“十一五”国家重点图书出版规划项目

973 CHINA
国家重点基础研究发展计划

燃烧源可吸入颗粒物的形成与控制技术
基础研究学术丛书

离散系统动力学演变过程的颗粒群平衡模拟

赵海波　郑楚光　著

科学出版社
www.sciencep.com

(TK-0069.0101)

国家重点基础研究发展计划

"十一五"国家重点图书出版规划项目

ISBN 978-7-03-021606-9

9 787030 216069 >

科 学 出 版 社
电话：010-64019417
E-mail:gcjs@mail.sciencep.com

销售分类建议：动力工程

定 价：55.00 元

“十一五”国家重点图书出版规划项目

燃烧源可吸入颗粒物的形成与控制技术基础研究学术丛书

离散系统动力学演变过程的颗粒群平衡模拟

赵海波　郑楚光　著

科学出版社

北　京

内 容 简 介

本书介绍了离散系统动力学演变过程颗粒群平衡模拟的基本概念、基础知识和最新研究进展，围绕颗粒群平衡模拟的三个主要研究内容，即动力学事件(包括颗粒碰撞、凝并、破碎、冷凝/蒸发、成核、沉积等)的核模型、颗粒群平衡方程的数值方法和颗粒群平衡模拟在复杂系统中的应用，进行了重点介绍，特别是有限惯性颗粒湍流碰撞核、零维颗粒群平衡模拟的多重Monte Carlo算法和事件驱动常体积法、多维颗粒群平衡模拟的多重Monte Carlo算法、颗粒群平衡模拟用于自然环境气溶胶和燃煤可吸入颗粒物等方面，详细介绍了作者最新的研究成果。

本书可供动力工程及工程热物理、化学工程、力学、数学、物理、核科学、大气物理化学、生物等领域从事颗粒群平衡模拟的相关科研人员、工程技术人员参考，同时也可供相关专业的研究生参考。

图书在版编目(CIP)数据

离散系统动力学演变过程的颗粒群平衡模拟/赵海波，郑楚光著. —北京：科学出版社，2008
(燃烧源可吸入颗粒物的形成与控制技术基础研究学术丛书)
ISBN 978-7-03-021606-9

Ⅰ.离… Ⅱ.①赵…②郑… Ⅲ.燃烧产物-粒状污染物-离散系统-系统动力学-平衡-模拟 Ⅳ.X513

中国版本图书馆CIP数据核字(2008)第048929号

责任编辑：刘宝莉 / 责任校对：陈玉凤
责任印制：刘士平 / 封面设计：王 浩

科学出版社 出版
北京东黄城根北街16号
邮政编码：100717
http://www.sciencep.com

中国科学院印刷厂 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2008年4月第 一 版 开本：B5(720×1000)
2008年4月第一次印刷 印张：17 3/4
印数：1—2 500 字数：336 000

定价：55.00元

(如有印装质量问题，我社负责调换〈科印〉)

《燃烧源可吸入颗粒物的形成与控制技术基础研究学术丛书》序

尽管进入21世纪，但是我国能源结构仍以矿物能源为主，煤炭和石油在很长时期内仍位居前列，由燃煤引起的SO_2、NO_x和颗粒物的污染仍是我国城市大气的主要污染来源。研究表明：我国大城市的主要污染物中，大约50%～60%是由燃煤和机动车燃油引起的，特别是细粒子部分，其比例更高。尽管近年来各地都采取了一系列改善环境的措施，城市总悬浮颗粒物和可吸入颗粒物的总体污染情况有所好转，但是，$PM_{2.5}$特别是亚微米颗粒物的总量却没有下降，而是有所上升，这说明我国城市大气的主要污染物正在转向更细的颗粒物。因此，针对燃烧源排放的细微颗粒物的研究势在必行。

在科技部的支持下，围绕国家重点基础研究发展计划(973计划)项目——"燃烧源可吸入颗粒物的形成与控制技术基础研究(2002CB211600)"组建了一支高水平的学术研究团队。经过五年的项目研究，他们在颗粒物的形成与控制基础两个方面都取得了重要的阶段性成果。这支团队由清华大学、北京大学、天津大学、华中科技大学、东南大学和中国环境科学研究院组成，每年举行一次超过100人的项目学术会议，形成了良好的学术交流氛围。在此项目研究期间，第一课题负责人郝吉明当选为中国工程院院士，第二课题负责人徐明厚成为"长江学者奖励计划特聘教授"和国家杰出青年科学基金获得者，首席科学家姚强在"十五"计划期间担任国家863洁净煤主题专家组成员、"十一五"计划863先进能源技术领域专家组成员兼工业领域节能减排总体专家组组长。

通过项目的研究，该学术团队提出了用于燃烧源颗粒物的采样、处理与分析的方法，例如，针对不同源与多种颗粒特性的撞击分离采样与分析系统、模拟大气过程的气溶胶综合反应箱、以显微PIV技术为核心的颗粒物在不同场中的运动规律的研究方法；研制搭建了一批具有国际先进水平的实验台架与测试仪器，例如，以全气缸取样为核心的柴油发动机颗粒物研究实验台，一维多燃料燃烧过程颗粒物形成与控制实验台，LII碳黑形成与控制测量系统和煤的沉降炉实验台等。

到目前为止，关于此973计划项目取得主要研究成果如下：

(1) 完成了不同燃料、不同燃烧方式的20多种典型的固定源和10多种移动燃烧源(柴油车和汽油车)的可吸入颗粒物的粒径分级分布特性、形貌结构特性、主量化学组成、重金属富集特性和有机污染物在不同颗粒物上的富集特性等的研究；

对我国燃用两种典型煤种的电厂各项目组进行了联合测试，获得了大量有关我国主要燃烧源可吸入颗粒物的基础数据；同时还进行了大量的实验室基础实验研究，获得了我国主要典型燃烧源可吸入颗粒物的物理化学特性及其形成的基本规律。

（2）通过对不同外部条件下可吸入颗粒物的多相流动、传热、传质与生长的规律的研究，以及在声场、电场、热温度场、磁场、相变环境、化学凝聚环境、自然环境等多种不同外力条件下的作用规律的实验和理论研究，首次获得了微米级颗粒在不同频率、不同声强的声场中不同位置的运动轨迹和团聚颗粒的运动轨迹，提出了一种确定粒径的新方法，并提出了相变、化学凝聚和预涂层技术等多个使颗粒团聚的技术研究方向。

（3）通过实验与模型分析计算，建立了以通用颗粒物方程为基础的颗粒物在燃烧过程与降温排放过程中的气—液—固相互转化的物理化学机制，包括气化、成核、长大、非均相反应、团聚等的形成与转化规律。研究包括了复杂的物理化学过程，如各种物质的挥发行为及其转化行为，半挥发性和挥发性组分，特别是有机污染物的变化行为等，发现了燃烧源颗粒的三模态特性可以用铝元素作为标志性元素进行相关的表征，很好地解释了中间模式形成的机理。

（4）根据可吸入颗粒物在产生、运动与演化过程中发生的一系列的碰撞和团聚，很好的预测了在降水过程中不同颗粒物的湿沉降，获得了碳烟（soot）形成过程的机理与主要影响因素，以及前体物在环境大气条件下转化为颗粒物的主要影响因素（包括温度、湿度等条件），并提出了在柴油机燃烧条件下控制碳烟形成的主要因素。

（5）通过采用先进的在线观测技术研究颗粒物在大气环境中的演变规律，对细和超细粒子数浓度谱分布的连续在线观测发现了北京新粒子的形成，对北京大气中二次颗粒物的形成规律有了新的认识。

（6）通过对不同荷电颗粒运动的研究，发现了荷电颗粒物在两相流动中两两相关的互相吸引、排斥、缠绕等规律；通过对微米级颗粒在碰撞与团聚的动力学过程的研究，发现了形成颗粒层结构与颗粒荷电、颗粒其他特性的关系，提出了微米颗粒动力学研究的新方法，为新型的电袋联合脱除技术的发展提供了基础数据，指明了新的研究方向（此方向已获得科技攻关计划的支持）。

（7）通过对内燃机颗粒物的过滤、催化氧化、等离子氧化等基本规律的研究，形成了具有催化过滤和等离子再生两项技术途径的颗粒物脱除与再生的新方法。

作为这一项目专家组的成员，本人一直跟踪这一项目的进展情况，上述成果表明将这一问题列入国家重大基础研究计划的正确性。这次科学出版社与项目组合作，共同将上述主要成果体现在一套丛书之中，是一件非常有意义的事。这套丛书是对五年基础研究成果的一个总结，为读者提供了关于燃烧源颗粒物从形成到排

放控制的系统知识。丛书介绍了该项目最具代表性的研究方法、研究手段和研究成果，同时在编写上既考虑了专业研究人员的需要，又考虑了普通读者的需求。整套丛书系统性和针对性强，对未来从事颗粒物形成、排放与控制的研究和技术开发的科技人员有着重要的参考价值。衷心希望研究工作能够继续深入，愿本丛书的出版对读者了解燃烧源颗粒物的形成规律和控制技术有所帮助，并进一步推动该领域的研究和技术发展。

徐旭常

中国工程院院士

2008 年 5 月于清华大学

前　　言

颗粒群平衡模拟(PBM)被广泛应用于各种工程和科学领域，它定量描述离散系统中颗粒的碰撞、凝并、破碎、冷凝/蒸发、成核、沉积等动力学事件，从而获取颗粒尺度分布的演变过程。描述颗粒尺度分布的时间演变过程实际上是研究一个被认为空间各向同性的零维颗粒群系统，如果把描述颗粒尺度分布时间演变的模型与多相湍流模型耦合起来，可以描述多维空间系统中颗粒尺度分布的时间和空间演变过程。本书为围绕零维颗粒群平衡模拟和多维颗粒群平衡模拟的核模型、数值方法和工程应用等阐述国际上最新研究进展和我们最新的研究成果。

本书共分为 6 章，第 1 章介绍颗粒群平衡模拟的基本概念和基础知识，指出颗粒群平衡模拟的难题和目前的研究进展；第 2 章介绍各种动力学事件的核模型，包括我们利用直接数值模拟在有限惯性颗粒湍流碰撞核模型方面所做的工作；第 3 章介绍零维颗粒群平衡模拟的数值方法，主要是对目前已有方法的综述；第 4 章则介绍我们在零维颗粒群平衡模拟的随机模型方面所做的工作；第 5 章进而介绍我们发展的多维颗粒群平衡模拟的随机模型，构建了颗粒群平衡模拟与四向耦合多相湍流模型的联系；第 6 章介绍我们发展的颗粒群平衡模拟随机模型的工程应用和研究展望。本书第 2 章中有限惯性小颗粒湍流碰撞核部分引用柳朝晖教授所指导的陈胤密硕士和李瑞霞硕士的部分研究工作，其他内容均由赵海波独立撰写，其中郑楚光全面指导了颗粒群平衡模拟这一工作的开展。书稿的组织、统稿、校核等工作由赵海波完成。

本书的出版，离不开国内外同行的帮助。在进行 PBM 的 Monte Carlo 方法的定量比较和定性分析的工作中，Themis Matsoukas 博士(Department of Chemical Engineering, Pennsylvania State University, USA)和 Arkadi Maisels 博士(Process Technology, Degussa AG, Germany)与作者进行了深入的学术交流，共同完成了此项工作；在进行降雨过程气溶胶湿沉降的工作时，北京大学大气环境系秦瑜教授以其深厚的专业造诣给予作者极大的帮助；在 PBM 研究的起始阶段，清华大学核能院的于溯源教授与作者进行了讨论，并邮寄了资料；清华大学热能工程系姚强教授在主持 973 项目“燃烧源可吸入颗粒物的形成与控制技术基础研究(2002CB211600)”期间、本实验室徐明厚教授在主持该 973 子课题“燃烧源一次颗粒物的生成、成核与生长机制(2002CB211602)”期间，均对作者的研究课题给予了科学的建议。借此机会对以上研究者表示深深的谢意。本书的出版同样离不开煤燃烧国家重点实验室和我们课题组打下的坚实的基础。在课题组多位老师和历届

博士生、硕士生的共同努力下，我们在气固两相流的雷诺应力-概率密度函数两相湍流模型、视密度加权平均两相湍流模型、直接数值模拟、大涡模拟、格子-玻尔兹曼模拟等方面都进行了相关工作，这些工作为本书的主要内容——离散系统动力学演变过程的颗粒群平衡模拟——打下了坚实的基础或对本书所述论题作了实质性工作，参与这些工作的研究者包括柳朝晖教授、郭照立教授、张军营教授、郑瑛教授、周向阳博士、邹春副教授、张立麒副教授、郭欣副教授、刘晶副教授、于勇博士、王汉封博士、贺铸博士、陈胤密硕士、李瑞霞硕士等。因此，本书是集体智慧的结果。

本书研究内容得到了如下课题的资助：国家重点基础研究规划项目（973）“燃烧源一次颗粒物的生成、成核与生长机制（2002CB211602）”、国家自然科学基金面上项目“颗粒尺度分布时间和空间演变过程的 Monte Carlo 描述（20606015）”、国家自然科学基金重点项目“西部煤中矿物质及特有污染组分在燃烧与转化过程中的迁徙、演化行为（90410017）”、973 课题“燃煤重金属脱除（2006CB200304）”、“燃煤 CO_2 分离与富集（2006CB705807）”、霍英东教育基金“复杂多相流动与化学反应体系的基础研究（114017）”等。

目前国内有许多关于多相流方面的专著出版，本书内容也可属于多相流领域的宏观数值模拟，但是目前尚没有专著对颗粒群平衡模拟进行系统的介绍，我们希望本书的出版能够做到抛砖引玉的作用，希望颗粒群平衡模拟能够在一定程度上得到国内同行的关注，并共同促进颗粒群平衡模拟在国内的发展，使其能够在各个自然和工程领域得到应用，为实际工作提供解决办法。

由于作者水平有限，对这个博大精深且高速发展的领域仅仅只有几年的研究积累，对于该领域的某些关键问题尚处于探索阶段和研究阶段，特别是我们关于多变量颗粒群平衡模拟和多维多变量颗粒群平衡模拟的工作还正在开展之中，书中肯定存在不足之处，恳切希望读者能够通过如下联系方式将意见反馈给我们，以此指导和促进我们今后的工作：hzhao@mail. hust. edu. cn 或华中科技大学煤燃烧国家重点实验室　赵海波（430074）。

目　　录

1 绪　　论

自然和工程领域广泛存在着复杂的多相流体系统，其基本特点是连续相(通常为气体或液体)携带大量的离散相颗粒群(通常为气体中的固体颗粒或液滴，或液体中的固体颗粒或气泡等)一起运动，连续相与离散相之间、离散相与离散相之间存在非线性、非平衡、非均匀、非稳态、多尺度的相互耦合作用。对这种颗粒流体系统(或称为离散系统)进行数值模拟和定量描述有利于揭示复杂系统的内部机理和规律、优化操作条件、指导系统设计和实验设计、进行模型参数辨识等。离散系统数值模拟的难点之一在于其复杂的动力学演变过程，包括颗粒碰撞、凝聚、破碎、冷凝/蒸发、成核、沉积、表面化学反应等物理化学过程。本章首先对离散系统及其动力学演变过程进行介绍，然后分别介绍两种可行的宏观数值模拟方案——四向耦合多相湍流模型和颗粒群平衡模拟，最后对本书主要结构和特色进行归纳总结。

1.1　离散系统动力学演变过程

离散系统广泛存在于自然环境、工业过程甚至社会领域中。在自然环境中，小到大气气溶胶的生成、生长和演变，或雨、雾、冰雹等的形成和降落，甚至海水泡沫破灭形成的盐晶颗粒，大到宇宙中星体的碰撞、爆炸等，均可纳入离散系统的研究范畴。工程领域中存在的离散系统更是数不胜数，所涉及的学科门类包括燃烧[如燃烧合成纳米颗粒；soot(碳烟)和 PAH(多环芳烃)的生成长大；固定源和移动源燃烧装置中可吸入颗粒物的生成、生长和迁徙；煤燃烧过程中微量重金属在可吸入颗粒物上的富集；内燃机喷雾燃烧；火灾过程中烟雾和碳黑的生成等]、公共健康(如室内气溶胶、烟草颗粒的成核、团聚等微物理化学过程)、化学工程(如流化床、精馏塔等过程设备中团聚体和气泡的破碎和聚并等；乳化液滴颗粒的聚合和表面化学反应等；结晶过程中晶体的生成和生长等；纳米粉体制备过程中的快速化学反应、凝并固化、摩擦破碎和干燥等；胶体的团聚、微混合和球化及结构重建现象，异类液相萃取过程中液滴颗粒的聚并、破碎、相间质量交换和相分离等)、一般工业工程(如焊接过程中飞溅的金属颗粒；交变电场或者声场中的粉尘或烟尘的聚并等)、生物医学工程(如细胞的生成、生长和分裂以及内部蛋白质组分如 DNA 和 RNA 的再分布等)、核工程(如核反应堆的安全性分析中，模拟爆炸过程中放射性颗粒的扩散沉降过程等)等领域。而社会和交通领域中物流、人流、车流的统计分析等，也可以借鉴离散系统的概念。

离散系统包括连续相和离散相，其所表现的宏观现象是连续相与离散相、离散相与离散相之间相互作用的结果。连续相本身的运动规律，特别是湍流现象，一直是几个世纪以来的研究热点，也是尚未解决的科学问题之一。已经发展了很多数学模型和方法来描述连续相湍流运动，如湍流模式理论（包括工程中广泛应用的 k-ε 模型、雷诺应力模型、代数应力模型等）[1~4]、大涡模拟[5~7]、直接数值模拟[8,9]、格子-玻尔兹曼方法[10]、离散涡模拟[2]、拟颗粒模拟[11]等。而对于离散相的描述，大致可以分为两大类方法[12]：基于欧坐标体系的拟流体模型和基于拉格朗日坐标体系的轨道模型。拟流体模型把颗粒相看作与流体相互相渗透、相互作用的连续介质，而轨道模型把颗粒相当作离散的群，它沿着颗粒轨道跟踪颗粒的运动和动力学行为，随机性轨道模型、确定性轨道模型、拉格朗日 Langevin 方程等均属于轨道模型。连续相与离散相之间的相互作用、相互耦合，即双向耦合（two-ways coupling）是多相湍流模型的关键之一，经过国内外诸多学者的努力，双向耦合多相湍流模型已经在工程领域较为普及，对于一些复杂系统，如流化床[11]、煤粉燃烧[12]、沸腾传热[13]，均能达到较高的模拟精度。

然而，对于离散系统而言，仅仅描述连续相、离散相以及连续相和离散相的双向耦合尚不足以对系统进行定量描述，离散系统的核心内容是离散相和离散相之间的相互作用。这种相互作用对于多相湍流模型而言，可以归纳为“四向耦合”（four-ways coupling）效应，或者专门称之为离散系统的动力学演变。本书的重点即离散系统的动力学演变过程。

1.1.1 离散系统的动力学事件

对于离散系统进行数值模拟和定量描述，重点关注的是离散单元（如离散的固体颗粒、液滴或气泡等）所经历的各种动力学事件[包括碰撞、凝并（或团聚、凝聚等）、（异相）冷凝/蒸发（或表面生长/消融）、（均相）成核、沉积（或清除、沉降等）、迁移（流入/流出）等]。通过统计离散单元（为简便起见，本书一般采用颗粒来指代离散单元）可以获取离散颗粒群的内部变量[internal variables，通常为单组分颗粒的尺度，也可包括多组分颗粒尺度、表面积、孔隙率、分形维数等；相应地，把颗粒位置、速度等称为外部变量（external variables）]的分布函数的时间和空间演变过程，其中最受关注的是颗粒尺度分布函数的时间和空间演变过程，即具有某个尺度的颗粒的数目浓度在时空坐标中的变化。由于离散颗粒群的宏观性质，如光散射、电荷吸附、毒性、辐射性、沉积率、捕捉策略、颗粒产品的品质等都与离散颗粒群内部变量的分布函数紧密相关，所以其分布模型便成为研究离散颗粒系统的一个关键，可以采用离散颗粒群内部变量的分布函数的时空演变过程来量化离散系统的动力学演变过程。

通常，离散颗粒的动力学事件不仅与离散颗粒群本身属性紧密相关，也同时受

控于连续相的运动规律。下面对几个主要的动力学事件进行简单介绍。

1）碰撞

颗粒碰撞(collision)是离散系统最常见和最关键的动力学事件之一。所谓碰撞，是指两个或两个以上的颗粒发生相互接触并分离开来的过程，碰撞前后颗粒本身的质量并无变化，但是颗粒之间存在动量和能量的交换，碰撞前后颗粒速度将发生改变，碰撞过程通常满足动量守恒定律。本书只考虑二元碰撞，其碰撞过程如图1.1所示。碰撞并不改变颗粒总数目和参与碰撞事件的颗粒的质量，但是改变参与碰撞事件的颗粒的动力学特性，所以碰撞导致颗粒尺度分布的空间演变而不影响颗粒尺度分布的时间演变。

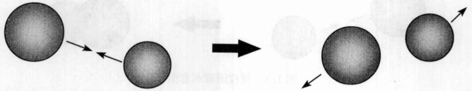


图 1.1 颗粒碰撞示意图

处理颗粒碰撞过程的模型可以分为两类，即软球模型和硬球模型[11,14~16]。软球模型也可称为离散单元法(discrete element method，DEM)，它将颗粒视为有弹性的物体，颗粒碰撞过程具有一定的接触时间，并通过弹性、阻尼和滑移的力学机理来计算接触力，其中弹性用于模拟变形效应，阻尼用于模拟缓冲效应。软球模型可以考虑多体碰撞，并通常将接触力与其他外力进行矢量叠加，将颗粒的悬浮过程与碰撞过程综合考虑，统一到牛顿第二定律中，以描述颗粒的位移和速度变化。硬球模型则假设颗粒之间的碰撞是有序的瞬时二体接触，并采用动量守恒定律来处理颗粒之间的相互作用，碰撞之后颗粒的平动速度和角速度可以由碰撞前的颗粒运动状态、恢复系数和摩擦系数来确定[17]。

2）凝并

颗粒凝并事件普遍存在于细微颗粒物演变过程中。所谓凝并，是指两个或两个以上的颗粒发生碰撞而粘结在一起而形成一颗尺度更大的颗粒。本书只考虑最常见的二元凝并。通常来说，如果事件发生前后的颗粒均为球形颗粒，可称为凝并(coagulation)，如图1.2所示，它常见于液滴和熔融颗粒之间的相互作用；而如果两颗颗粒粘结在一起而生成不规则体的大颗粒，则这种事件依据不同的学科或工程领域可以称为聚结(coalesce)、团聚(agglomeration)、聚集(aggregation)、絮凝(flocculation)等，如图1.3所示，它常见于燃烧、胶体、结晶、造粒等领域中细微颗粒物的相互作用。实际上，可以通过质量分形维数(mass fractal dimension，D_f)把不规则颗粒团按照球形颗粒进行处理，此时不规则颗粒的当量体积为 $v=\pi d^{D_f}/6$，

对于球形颗粒，$D_f=3$。本书把这类事件一般统称为凝并事件。

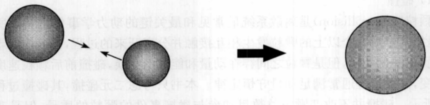


图 1.2 颗粒凝并示意图

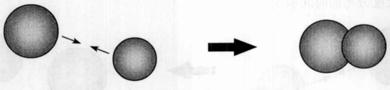


图 1.3 颗粒团聚示意图

一次二元凝并事件之后颗粒群总数目减一而总质量不变，参与事件的颗粒的动力学特性(如速度、动能等)均会发生变化，所以凝并事件导致颗粒尺度分布的时间和空间演变。通常认为凝并事件前后遵循动量守恒定律。

颗粒凝并事件一定是由于碰撞事件所引起的，但是并非所有的碰撞事件均直接导致凝并事件。凝并核模型由三个相互关联的模型决定[18]：几何碰撞率、碰撞效率、凝并效率。颗粒几何碰撞率描述了颗粒之间在同一时刻理论上轨道发生交叉的概率[19~28]。实际上，因为颗粒与颗粒之间存在范德华力的影响，也因为颗粒空隙之间湍流对颗粒的作用，在理论上同一时刻轨道交叉的颗粒可能会相互滑移开来，并不发生真正的碰撞，这可以通过碰撞效率模型[29~35]来考虑。布朗扩散、湍流聚集效应、湍流输运效应、静电吸附等机理是决定几何碰撞率和碰撞效率的关键。即使颗粒之间发生碰撞，也可能存在弹性或非弹性碰撞、凝并、破碎等结果，可以提出一个考虑颗粒之间各种相互作用力和颗粒流体黏性、温度等属性的凝并效率模型[29,33,36]。在第 2 章中将详细描述这些模型。

颗粒碰撞和凝并事件均涉及两颗已存在的颗粒，故可称之为双颗粒事件。双颗粒事件的主要机理包括湍流作用(turbulent effect)和布朗扩散(Brownian diffusion)。

3）球化

球化(spheroidization)事件是指不规则的团聚体表面积动态变化(通常为表面积随时间缩小)而其总质量保持不变的过程，这个过程可能是由于温度升高过程中颗粒表面张力所引起的，很多领域也称该事件为烧结(sintering)事件，如图 1.4 所示。该事件常见于燃烧过程中 soot 生成、可吸入颗粒物生成等。通过跟踪离散颗粒的表面积这一内部变量来考虑该事件主导下的颗粒群动力学演变过程。

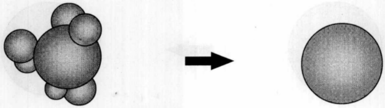


图 1.4 颗粒球化示意图

4) 破碎

颗粒破碎(breakage,fragmentation)事件是指一颗母颗粒的内部结构受到外力(如不均匀的热应力、体积力、冲击力等)作用而分裂成若干个子颗粒的过程,如图 1.5 所示。破碎过程中颗粒质量保持不变而颗粒数目增多。破碎机理非常复杂,需要根据实际情况具体分析。

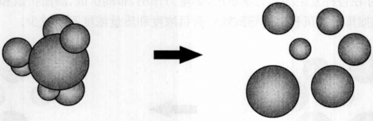


图 1.5 颗粒破碎示意图

5) 异相冷凝/蒸发

颗粒的异相冷凝/蒸发(heterogeneous condensation/evaporation)(本书简称为冷凝/蒸发)事件是由于远离颗粒的冷凝组分蒸气压力(p^{∞})和靠近颗粒的冷凝组分平衡蒸气压力(p^{eq})之间的差异导致的气-固(液)两相之间的质量迁移过程。如果 $p^{\infty} \geqslant p^{eq}$,冷凝现象发生,气相组分凝结到固体颗粒或液滴上;如果 $p^{\infty} \leqslant p^{eq}$,则蒸发现象发生,固体颗粒或液滴的组分挥发到气体环境中。冷凝现象与蒸发现象机理相同,方向各异。很多场合,冷凝/蒸发也称为表面沉积(生长)/消融[surface deposition(growth)/dissolution]等,可以把其类比于气相分子团与离散颗粒的凝并事件。冷凝/蒸发并不改变颗粒总数目浓度,但是将改变颗粒质量浓度。冷凝/蒸发事件非常普遍,如易挥发的痕量重金属蒸气在超细微颗粒物上的冷凝[37];珠状凝结小球的传热[38];喷雾过程中小液滴在高温环境中的蒸发[39]等。图 1.6 为颗粒冷凝事件示意图。导致冷凝/蒸发的机理包括输运所控制的扩散(主要作用于自由分子区)、分子轰击(molecular bombardment,主要作用于连续区)、表面控制的化学反应和颗粒控制的体积反应等。

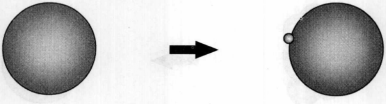


图 1.6　颗粒冷凝示意图

6）沉积

颗粒沉积(deposition)事件指某颗粒从颗粒群中逃逸出来而不再参与离散系统动力学演变过程，如图 1.7 所示，有些领域可以称其为清除(removal)或沉降(scavenging)等事件。飞灰颗粒在除尘器(静电除尘器、湿式除尘器、机械式除尘器、过滤式除尘器等)中被收集的过程、飞灰颗粒在炉膛水冷壁、烟道内的结渣等过程、飞灰颗粒排出烟囱后在大气中的干沉降和湿沉降等过程，均可以笼统地归结为颗粒的沉积。各种过程存在各种复杂的动力学机理，如重力作用、布朗扩散、湍流扩散和输运、电荷吸附、液滴捕集等。沉积事件导致颗粒数目浓度和质量浓度不断减少。

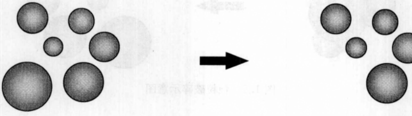


图 1.7　颗粒沉积示意图

7）表面化学反应

颗粒表面所发生的化学反应(chemical reaction)同样也可归纳入动力学事件，如 soot 颗粒表面的碳原子活性点(active sites)可能与气相组分中的 O_2 或 OH^- 基团发生表面化学反应，这种化学反应通常不会影响颗粒数目浓度，但是将对颗粒质量浓度和颗粒表面积产生影响。化学反应事件的简单示意如图 1.8 所示，有时可以把这种事件类比于表面沉积(生长)/消融事件。

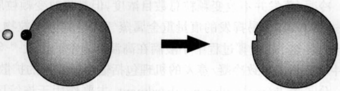


图 1.8　颗粒表面化学反应示意图

球化、破碎、冷凝/蒸发、沉积、表面化学反应等事件只涉及一颗已存在的颗粒，可以称这些动力学事件为单颗粒事件。

8) 均相成核

均相成核(homogeneous nucleation)(或自身成核)是指过饱和体系中气相(或液相)介质中的某些分子团吸附气体(或液体)分子而使得自身尺度超过临界成核尺度，从而转化为固相(或液相)的过程，它实现了气相(或液相)向固相(或液相)的质量迁移，如水蒸气与SO_3(气体)结合生成H_2SO_4(液滴)的二元成核过程[40]。成核过程如图1.9所示，其机理包括产生过饱和的物理过程(绝热膨胀、混合、传导冷却和辐射冷却等)和气相化学反应(分为自身成核和多元成核)等[41]。成核对颗粒质量浓度和数目浓度都有重要的影响。

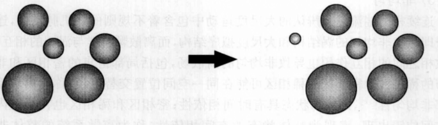


图1.9 颗粒成核示意图

通常认为成核事件的发生取决于前驱体(precursor)而并不涉及任何一颗已存在的颗粒，故可称之为零颗粒事件。

1.1.2 离散系统动力学演变过程的基本特点

离散系统的动力学事件涉及非常复杂的物理化学过程，且离散系统本身属于多相复杂系统，连续相本身的湍流机制、离散相与连续相相互耦合等均极为复杂，这些现象直接导致离散系统动力学演变过程存在如下基本特点：

1) 非线性

各种动力学事件均存在非常复杂的机理，如处于滑移区和过渡区的细微颗粒[尺度一般在0.1～1μm，Knudsen数(Kn)一般在0.1～10，其中$Kn=2\lambda/d_p$，λ为气体分子平均自由程，表示相邻两次碰撞之间气体分子移动的平均距离，d_p为颗粒直径]的碰撞和凝并事件同时受控于湍流作用和布朗扩散，两种机理存在本质的区别，均对颗粒的动力学演变过程施加非线性影响，但是两种机理又并非完全相互独立，目前尚没有信服的理论能够定量描述过渡区的细微颗粒的碰撞/凝并过程。另外，不仅仅同一种动力学事件存在复杂的动力学机理，同一颗粒还可能同时经历多个动力学事件，这些效应均不是线性叠加的，描述颗粒群动力学演变过程的守恒方程通常是部分积分微分方程，将在1.3节详细介绍。以上所述实际上属于离散

系统的内在非线性性，另外外界和非规则因素也会导致离散系统的非线性性，称为次生非线性性[11]。

2）非平衡

离散系统中连续相和离散相、离散相和离散相之间的相互耦合和相互作用，导致了离散系统复杂的耗散结构，同时也存在连续相和离散相的自组织、分岔现象和混沌行为等。李静海等[11]的研究认为，离散系统（颗粒流体系统）中两相耗散结构的形成和消失与分岔行为及能量（或熵产率）的突变行为有关，状态的多值性导致分岔，分岔导致耗散结构的形成，而耗散结构的稳定性条件又制约着耗散结构的变化和消亡。实际上，离散系统的耗散结构的存在本身就意味着系统处于远离平衡的状态之中。

3）非均匀

连续相的湍流是可辨认的大尺度运动中包含着不规则的随机脉动[3]，连续相本身即存在非均匀的涡结构和大尺度拟序结构，而离散颗粒群与涡团的相互作用、离散相之间的相互作用也导致非均匀的离散场，包括局部富集的密相区和非均匀分布的稀相区。密相区和稀相区可能在同一空间位置交替出现，称为离散系统的局部非均匀性[11]，即局部状态具有时间相依性；密相区和稀相区也在系统内部不同空间位置出现，表现为整体状态的空间相依性，称为离散系统的整体非均匀性[11]。离散系统的非均匀性对其动力学演变过程的数值模拟提出了额外的要求，即必须考虑空间关联的动力学事件以及离散相的空间扩散。

4）非稳态

离散系统涉及非常复杂的物理化学过程（即各种复杂的动力学事件），它们往往对离散颗粒群内部变量的分布函数产生不可逆的影响，这导致颗粒群内部变量的分布函数随时间而不断演变。需要指出的是，通常可认为离散系统在“将来”的状态，仅与它“现在”所处的状态有关，而与“过去”所处的状态无关，即可认为离散系统中各种动力学事件的发生满足标准的 Markov 过程。离散系统的非稳态性要求数值模拟必须考虑时间关联的动力学事件和非稳态的连续相和离散相。

5）多尺度

离散系统的多尺度特征可以从多个方面来理解。首先，连续相湍流本身的多尺度特性。众所周知[3]，湍流是连续流体系统中多尺度的不规则运动，一般可以把湍流场分解为规则的平均场和不规则的脉动场，而实际上湍流脉动并不是完全不规则的随机过程，而是在不规则的脉动中包含可辨认的有序大尺度运动，即切变湍流中存在大尺度的拟序结构，而且有结构的不规则运动受控于确定性非线性微分方程本身，在确定性非线性微分方程中可以获得渐近的不规则解，即所谓的混沌现象。第二方面，离散颗粒群本身的多尺度特性。颗粒群本身通常具有宽频谱特性，而不同尺度的颗粒的动力学事件机理各异。如根据颗粒的 Knudsen 数的大小，颗

粒处于自由分子区、过渡区、滑移区或连续区，不同区域内颗粒的碰撞、凝并等过程的布朗作用机理完全不同。连续相和离散相的多尺度特性是由于不同控制机理相互协调的结果[11]。第三方面，连续相和离散相的多尺度关联和耦合。连续相和离散相本身的多尺度特性必然导致共存的多相系统的多尺度特性，相间的相互作用和耦合存在典型的多尺度特征。例如，根据颗粒自身的弛豫时间尺度 τ_p 与 Kolgomorov 时间尺度 τ_K、流体积分时间尺度 T_e 之间的大小关系，可以把颗粒形象地分为细微颗粒（$\tau_p \ll \tau_K$）、有限惯性颗粒（$\tau_K < \tau_p < T_e$）和粗重颗粒（$\tau_p \gg T_e$），每类颗粒与流体之间的相互作用存在很大的差异。细微颗粒（或无惯性颗粒，颗粒的 Stockes 数等于 0）完全追随流体运动，颗粒运动受小尺度湍流耗散涡团和颗粒的相互作用的影响；粗重颗粒（颗粒的 Stockes 数无穷大）则认为颗粒之间相互独立而不存在任何关联，类似于稀薄气体分子做混乱无序的自由分子运动，颗粒运动受大尺度湍流含能涡团的作用；有限惯性颗粒则同时受湍流小尺度耗散涡团和大尺度含能涡团的作用，颗粒之间相互关联。第四方面，时空多尺度。复杂离散系统的多尺度结构同时表现在时间和空间上，且互相耦合，空间多尺度结构是控制机制的协调在某一时刻的表现方式，而结构的时间多尺度变化则是这种协调表现出来的一种过程[11]。关于复杂离散系统的多尺度特性，在李静海等人的专著《颗粒流体复杂系统的多尺度模拟》里面有更深邃的讨论。

综上所述，离散系统的动力学演变过程是一个空间非均匀、时间非稳态的过程，它受控于各种非线性、非平衡、多尺度的动力学控制机制（即各种动力学事件如碰撞、凝并、破碎等）。这些显著的特色导致对其进行数值模拟和定量描述存在很大的困难，目前尚未能很好地解决这个问题。实际上，目前多相流的宏观数值模拟领域的研究重点已逐渐从单一的工程视野向更为科学的高度转变，并最终服务于高精度和高效率的工程预报。本领域的关键热点包括连续相与离散相间的相互作用、离散相与离散相间的相互作用等，尤其是颗粒碰撞、相变、凝并等过程。综合近年来该领域的研究内容，对离散系统动力学演变过程的宏观数值模拟工作大概可以分为两大块。一块是从经典的两相湍流模型出发，逐渐从以往的单向耦合（只考虑流体相对颗粒相的影响）普及到双向耦合（考虑流体相和颗粒相的相互影响）再发展到四向耦合（同时考虑两相相互影响以及离散颗粒群的动力学事件）多相湍流模型。另外一块是颗粒群平衡模拟（population balance modeling，PBM），即考察离散单元（如多相流中离散的固体颗粒、液滴或气泡等）在各种动力学事件主导下颗粒群的内部变量（通常为单组分颗粒的尺度）的分布函数的时间和空间演变过程。

1.2 四向耦合的两相湍流模型

占据主流地位的描述流体相流动的湍流模型基于欧拉坐标体系，即把流体当

作连续相来处理，而对颗粒相的描述一般基于拉格朗日坐标体系，即把其作为离散相处理。但是也有一些模型把实际离散分布于流体中的颗粒相假设为充满整个空间没有间隙的流体，此时基于欧拉坐标系来描述颗粒相。因此，根据对连续相和离散相的处理方式不同，一般可以把两相湍流模型划分为双流体模型（或称为欧拉-欧拉模型）和流体-轨道模型（或称为欧拉-拉格朗日模型）。

在两相湍流模型中考虑四向耦合是必要的。以气固两相流中最常见的颗粒碰撞为例。在煤粉燃烧器的喷口附近，以及有壁面约束流动、特别是旋转流动的壁面附近，颗粒的体积浓度很容易超过 $O(10^{-4})$，颗粒-颗粒碰撞以及颗粒碰撞对流体湍流的影响都很显著，颗粒之间的碰撞产生的冲量使得颗粒动量发生变化，颗粒之间的摩擦作用使得颗粒能量发生转移，颗粒相互碰撞也导致颗粒旋转速度产生或者发生改变，这将使得颗粒承受相当数量级的 Magnus 力，从而改变颗粒的运动轨迹，这些都将影响流体相湍流运动[42]。因此，随着气固两相流模型和数值计算方法的发展以及计算能力的提高，有必要在气固两相流动的数值模拟中充分考虑颗粒间相互作用对流动的影响，也就是所谓的四向耦合。双流体（多流体）模型（或称为欧拉-欧拉模型）和流体-轨道模型（或称为欧拉-拉格朗日模型）均可以考虑四向耦合。

1.2.1 双流体模型

双流体模型中连续相和离散相可以采用形式统一的控制方程（质量、动量和能量守恒方程）进行描述，并可以采用相同的数值方法来求解非线性控制方程。它的显著优点包括计算代价少、建模和求解的统一性等。双流体模型的难点在于连续相应力和离散相（或泛称为固相）应力本构方程的模型封闭，特别是当需要考虑四向耦合效应时，难点集中体现在固相黏度和固相压力的模型封闭。由于双流体模型认为流体和颗粒可以共享同一位置，流体和颗粒相互渗透、相互作用，并可在整体上视为一种特殊性质的介质，因此，难以建立相间作用和颗粒间作用的数学表达式。对于固相黏度和固相应力，早期采用经验关联式来处理，如对于固相黏度的处理，采用的方法包括忽略固相黏度、假设固相黏度为常数、将固相黏度看作固相浓度的函数；对于固相压力，一般采用固相弹性模量来描述等。

目前在双流体模型中考虑四向耦合效应的主流方法是采用颗粒动理学理论（kinetic theory of granular flow）。这种理论来源于分子动理学理论，把颗粒运动类比于气体分子的热运动，颗粒的动量传递机制被分解为颗粒碰撞传递和两次碰撞之间的悬浮传递两种[11]。颗粒动理学理论主要用于考虑颗粒碰撞，Sinclair[43]和 Gidaspow 等[44]首先运用颗粒动理学理论模拟流化床中气固两相流动，Nieuwland 等[45]模拟了提升管中气固流动，祁海鹰等[46]模拟了有限空间内的风沙流动，魏飞和金涌等[47]发展 k-ε-k_p-ε_p-Θ 双流体模型模拟了循环流化床中提升管气固两

相湍流，Balzer[48]较为全面地总结了颗粒动理学理论与双流体模型的耦合。总体而言，颗粒动理学理论目前存在的问题主要是[11]：采用分子混沌假设，认为颗粒速度分布满足空间各向同性，与实际情况不符合；难以考虑摩擦应力和细颗粒之间的黏附作用；单参数颗粒碰撞模型只考虑法向碰撞力，可能低估了碰撞引起的能量耗散等；应用于多分散性系统时非常复杂；等等。

另外，周力行等[49]将颗粒脉动分成湍流引起的大尺度脉动和颗粒间碰撞产生的小尺度脉动，建立了颗粒相双尺度二阶矩两相湍流模型，考虑了颗粒之间的碰撞，与单尺度二阶矩模型相比，对于颗粒相脉动速度和雷诺应力等模拟结果有一定程度的改进。张夏和周力行[50]提出了考虑颗粒-壁面碰撞的双流体模型，可以考虑摩擦系数、恢复系数、壁面粗糙度等因素对颗粒湍流的影响，相比较于完全弹性碰撞和非弹性碰撞模型有明显改进。

目前四向耦合的双流体模型绝大部分均只有考虑颗粒碰撞的能力，通常所说的碰撞并不会引起颗粒尺度分布的时间演变，但是将导致颗粒尺度分布的空间扩散。双流体模型如果需要考虑颗粒凝并、破碎等动力学事件，此时另外的一个关键问题是要构建考虑各种动力学事件的颗粒湍流模型，限于凝并、破碎、冷凝/蒸发、成核、沉积等动力学事件的复杂性，目前这方面的研究尚处于探索阶段。

总体而言，在欧拉坐标体系中描述颗粒相运动或颗粒尺度分布的动力学演变存在如下固有难点：双流体模型基于容积/统计平均描述，对颗粒运动特征的分辨率小于拉格朗日模型，较难考虑四向耦合，目前很少有研究能够在双流体模型中考虑颗粒凝并、破碎、冷凝/蒸发、成核和沉积等动力学过程。与之相对应的是，在拉格朗日坐标体系中跟踪离散颗粒的轨道，可以获取颗粒的轨道经历效应和历史效应，从而能得到颗粒动力学演变过程的细节信息，可方便处理多维、多组分、多分散性（宽筛分）颗粒群，具有考虑四向耦合的友好性。

1.2.2 流体-轨道模型

轨道模型实际上实现了对颗粒运动的直接数值模拟，其关键问题是如何考虑颗粒-流体相互作用和颗粒-颗粒相互作用。考虑颗粒-流体相互作用的模型和算法已经发展得相对成熟，如各种形式的随机性轨道模型和确定性轨道模型通过对流体-颗粒之间各种相互作用力（特别是曳力）的模拟、拉格朗日 Langevin 方程通过考虑颗粒所见流体微元的运动，均可以有效地考虑双向耦合，描述颗粒湍流扩散的轨道穿越效应、惯性效应和连续性效应以及颗粒湍流运动的各向异性甚至局部富集等[1,51]。考虑颗粒-颗粒之间相互作用的四向耦合轨道模型则是近年来的研究趋势。目前这类模型的重点仍然是处理颗粒碰撞过程。

一般来说，在流体-轨道模型中描述颗粒动力学演变过程时，通过一个算子分裂技术（operator-splitting technique）来根据 t 时刻颗粒状态参数来计算 $t+\Delta t$ 时

刻颗粒状态参数，实际上是把颗粒自由运动（无动力学事件）与颗粒动力学演变过程互相解耦。此时往往把计算区域划分为若干网格，在每个网格内认为流体场和颗粒场满足均匀各向同性，且对于碰撞、凝并等双颗粒事件，一般仅仅在同一网格内进行处理，虽然实际上发生双颗粒事件的两颗颗粒在该时间步长内可能并不在同一网格之内。一般存在如下三类方法考虑颗粒发生双颗粒事件时的动力学演变过程：

（1）基于颗粒轨迹的详细信息。这种方法通过跟踪实际颗粒轨道，利用颗粒轨道交叉来考虑颗粒碰撞和凝并等，能够揭示颗粒碰撞的一些细节和关键参数。Collins 等[52]在 DNS 方法中跟踪实际颗粒轨道，利用颗粒轨道交叉来考虑颗粒凝并，能够揭示颗粒凝并的一些细节和关键参数，但如用于工程计算，则计算代价过大；郭印诚等[53]发展格子-确定性轨道模型考虑颗粒碰撞，认为颗粒的碰撞大部分发生在同一控制容积，并采用另外的“格子”来修正，从而可以减少碰撞判断的次数，计算量显著降低（他们的算例可减少两个数量级的计算时间），但其修正方法经验性较强，且误差较大。

（2）基于直接模拟 Monte Carlo（DSMC）方法，通过模拟少数的几对“虚拟”碰撞来重现物理系统中可能存在的大量真实碰撞事件。此时一般依据动力学事件的发生速率、利用随机数来判断颗粒何时何地发生何种动力学事件、与哪些颗粒发生相互作用等，而颗粒 i 与网格内某颗粒 j 发生双颗粒事件的概率

$$P_{ij} = n_j \pi (r_i + r_j)^2 |v_i - v_j| \Delta t$$

式中：r_i、r_j 分别为颗粒 i 和 j 的半径；n_j 为颗粒 j 的数目浓度；v_i、v_j 为颗粒 i 和 j 的速度。

Tsuji[54]利用经典的 DSMC 方法来处理颗粒碰撞，采用修正的 Nanbu 算法来确定与颗粒 i 发生碰撞的颗粒，要求事先得到那些与 i 相邻的颗粒的状态信息，一般来说要求较高的计算机内存和 CPU 时间；由长福等[55]也采用类似的 DSMC 方法描述了循环流化床中颗粒碰撞；樊建人等[56]提出了一个新的几何碰撞率模型，且认为虚拟碰撞颗粒的选择应该按照不同颗粒类在网格中的实际个数来进行搭配，并提出了相应的匹配方法，但是并未对其算法进行细观分析和数学证明；Sommerfeld[57]则提出了一种单颗粒方法（single-particle method，SPM）在欧拉/拉格朗日两相流模型框架下考虑颗粒碰撞和凝并，此时并不要求得到相邻颗粒的任何信息，而是采用一个测试颗粒（test particle）与虚拟碰撞伙伴（fictitious collision partner）之间的碰撞来描述实际碰撞过程，其中虚拟碰撞伙伴根据当地尺度分布函数信息而随机产生，可以较高精度地处理低颗粒浓度区域的碰撞过程，但是这种方法需要保存每个网格之内的颗粒尺度分布函数（PSDF）信息，需要较多的计算机内存，Haviland 等[58]把 PSDF 保存成频率分布图（histogram），而 Sommerfeld[57]

则对 PSDF 进行参数化近似，Valsov[59]提出的场颗粒或目标颗粒（field particles or target particles）概念则较好地解决了内存需求问题。

（3）类比空气动力学中分子间碰撞。Pai[60]在颗粒相的 Boltzmann 方程中考虑颗粒间碰撞作用，直接求解颗粒相的 Boltzmann 方程从而得到颗粒相的速度分布函数，但是该类方法的分子碰撞类比假设限制了其应用范畴。

处理颗粒碰撞动力学的基本模型有硬球模型和软球模型。硬球模型主要考虑二元碰撞，碰撞之后颗粒的线速度、角速度则根据动量守恒定律由碰撞前颗粒运动状态及恢复系数和摩擦系数确定。Kitron 等[61]发展了一种颗粒刚性碰撞简易模型；Lun[17]提出了考虑颗粒旋转的颗粒碰撞动力学模型，考虑颗粒间碰撞的滑移和黏性。软球模型则可以考虑多体碰撞，日本的 Tsuji 课题组[62]广泛应用软球模型来模拟流化床和循环流化床中颗粒碰撞，得到了与实验相符合的最小鼓泡速度、压力波动频率、颗粒的团聚和分散、气泡的长大和破碎等。

在流体-轨道模型的框架下考虑颗粒凝并、破碎、沉积、成核、冷凝/蒸发等动力学事件的研究仍然较少。Sommerfeld 等[63]采用随机轨道模型、引入几何碰撞率、碰撞效率和凝并效率描述了细微颗粒的凝并和不完全弹性碰撞等；Ramkrishna 等[64]采用单颗粒法考虑空间各向同性的凝并-破碎问题，Kraft 等也利用单颗粒法描述了内燃机内轴对称旋转式接触器内液滴的凝并和破碎行为[65]，并基于质量流量法（mass flow algorithm，MFA）采用单颗粒方法描述颗粒凝并动力学[66]。这方面的研究需要得到继续深入，难点之一在于模型的复杂性。

双流体模型和流体-轨道模型的共同特点是运用质量、动量和能量守恒方程来描述连续相和离散相，并考虑两相之间的相互耦合和离散相之间的相互作用。它们均是通过获得离散系统的详细信息来表征其动力学演变过程，其模型一般较为复杂、较难考虑复杂的动力学事件。实际上，对于这些离散系统，工程上关注的光散射、电荷吸附、毒性、辐射性、沉积率、捕捉策略等均直接相关于离散颗粒群某些内部变量的分布函数，尤其是颗粒尺度分布函数。颗粒群平衡模拟的特点就是仅仅抓住颗粒尺度分布函数这个关键参数，利用颗粒尺度分布函数的时空演变过程来量化离散系统的动力学演变过程。

1.3 颗粒群平衡模拟

颗粒群平衡模拟（PBM）在离散系统动力学演变过程的数值模拟方面展现了强大的生命力，促使国际学术界对其给予了高度的关注，使其成为近期的研究热点之一。著名化工和多相流期刊 *Chemical Science Engineering* 于 2002 年 57 卷 12 期及 2006 年 61 卷 1 期以专辑的方式介绍了颗粒群平衡模拟，诸多国际会议如 International Conference on Population Balance Modelling、Proceedings of the

Combustion Institute、World Congress of Chemical Engineering、PARTEC、International Conference on Modelling Particulate Systems 等均将 PBM 作为主题或专题，把近几十年来复杂离散系统中颗粒群平衡模拟的研究推向高潮。

在颗粒群平衡模拟中，离散系统被视为一个服从统计学规律的整体，每个动力学事件的发生服从某种概率[或称为核(kernel)]，这些概率与整体系统属性(如多相流场等)、颗粒群内部变量(如单组分或多组分颗粒尺度、分形维数、孔隙率、表面积、组分浓度等)等紧密相关，但是统计上仍然可由一些核模型所描述，而这些颗粒群内部变量的动力学演变过程可由颗粒群平衡方程(population balance equation，PBE)或称为通用动力学方程(general dynamic equation，GDE)所描述。

颗粒群平衡方程是一个典型的部分积分微分方程，对于通常的多分散性(宽筛分)和多组分的颗粒群和非线性的核模型而言，在高维相空间 $R^{d\times\xi\times t}$($d=1,2,3$ 表示空间域，$\xi=1,\cdots,p$ 表示颗粒群内部变量域，t 表示时间域)进行积分微分将非常困难，所以 PBM 需要解决的瓶颈问题，首当其冲就是 PBE 的数值方法。另外，进行颗粒群平衡模拟需要已知的动力学事件发生速率的模型，即所考虑的动力学事件的核模型，而核模型往往与受控于离散系统中各种复杂的调控机制，尽管人们已经建立了诸多合理的核模型如布朗凝并核和湍流凝并核等，但是仍然需要对非线性非平衡多尺度系统的控制机制加深认识，从而获取更精确的核模型，这有赖于严密的理论分析、精确的实验研究和细致的数值模拟。并且，颗粒群平衡模拟的目的是对各种复杂离散系统的动力学演变过程进行定量描述，但是涉及实际工况，操作条件、边界条件、所需要考虑的动力学事件和机理等各不相异，有些离散系统还涉及复杂的化学反应、多相流场等，而且在各个领域各个实际工况中进行颗粒群平衡模拟的目的也迥然不同，此时颗粒群平衡模拟是相当复杂的工作。所以，英国谢菲尔德大学 Hounslow 教授[67]把颗粒群平衡模拟的研究分为三类，即颗粒群平衡方程的数值求解方法、描述动力学演变过程物理化学内涵的核模型以及颗粒群平衡模拟方法在各种复杂离散系统中的应用。本书的主要内容也依据此展开，并重点介绍 PBM 的数值方法。

从 1917 年 Smoluchowski[68]首先提出凝并方程至 21 世纪初期，文献上可见的绝大部分研究集中于零维空间系统中单个内部变量(通常为颗粒尺度)的颗粒群平衡模拟，研究目标为离散系统中颗粒尺度分布函数[particle size distribution function，PSDF，有时也直接简称为颗粒尺度分布(PSD)]的时间演变过程，此时认为颗粒场均匀且各向同性。而自然和工程领域的绝大部分实际工况中颗粒场是空间各向异性的，不管是对于颗粒体积分数较高的问题还是颗粒体积分数较小的问题。所以描述 PSDF 的时间和空间演变过程是一项重要的研究课题，这正是多维颗粒群平衡模拟可以解决的问题。显然，零维颗粒群平衡模拟是多维颗粒群平衡模拟的基础，把零维颗粒群平衡模拟与多相流模型耦合起来即可实现多维颗粒群平衡

模拟。下面分别对零维 PBM 和多维 PBM 的数学模型进行简单的介绍，第 2 章将详细介绍典型动力学事件的核模型，第 3～5 章将详细介绍各种 PBM 的数值方法，第 6 章将介绍 PBM 在复杂系统中的应用。

1.3.1 零维颗粒群平衡模拟

基于颗粒稀疏和分子混沌假设、建立在欧拉坐标体系的颗粒尺度分布函数的平衡方程(PBE 或 GDE)如下所示[40,41,64]：

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial n(v,t)}{\partial t} = & \left\{ \frac{1}{2}\int_{v_{\min}}^{v} \beta(v-u,u,t)n(v-u,t)n(u,t)\mathrm{d}u \right. \\
& \left. - n(v,t)\int_{v_{\min}}^{v_{\max}} \beta(v,u,t)n(u,t)\mathrm{d}u \right\}_{\text{凝并}} \\
& + \left\{ \int_{v}^{v_{\max}} \gamma(u,v,t)b(u,t)S(u,t)n(u,t)\mathrm{d}u - S(v,t)n(v,t) \right\}_{\text{破碎}} \\
& - \left\{ \left[\frac{\partial(I(v,t)n(v,t))}{\partial v} \right] \Big\| \left[C_{\text{sur}} D_{\text{sur}}(v-v_0,t)n(v-v_0,t) \right. \right. \\
& \left. \left. - C_{\text{sur}} D_{\text{sur}}(v,t)n(v,t) \right] \right\}_{\text{冷凝/蒸发}} \\
& + \{J(v,t)\delta(v_{\text{nul}},v)\}_{\text{成核}} - \{E(v,t)n(v,t)\}_{\text{沉积}} + \{R_{\text{chemical}}\} + \{R_{\text{other}}\}
\end{aligned} \tag{1.1}
$$

式中：$n(v,t)$为颗粒尺度分布函数($\mathrm{m^{-3}\cdot m^{-3}}$)；$n(v,t)\mathrm{d}v$ 表示时刻 t、尺度范围在 $v\sim v+\mathrm{d}v$ 内的颗粒在单位体积内的数目浓度；$\beta(u,v,t)$是时刻 t、两颗粒(尺度分别为 u 和 v)的凝并核，表示单位时间内两颗粒发生一次凝并事件的概率($\mathrm{m^3/s}$)；$S(v,t)$、$J(v,t)$和 $E(v,t)$分别为颗粒(v)的破碎核、成核核和沉积核，均表示单位时间内该颗粒发生一次对应事件的概率($\mathrm{s^{-1}}$、$\mathrm{s^{-1}\cdot m^{-6}}$、$\mathrm{s^{-1}}$)；$\gamma(u,v,t)$为母颗粒($u$)破碎产生子颗粒($v$)的概率；$b(u,t)$为母颗粒($u$)产生的子颗粒数目；符号"[a] ‖ [b]"代表从连续形式冷凝/蒸发表达式和离散形式冷凝/蒸发表达式中选择其中一个，在连续形式冷凝/蒸发表达式中，冷凝/蒸发核 $I(v,t)$表示颗粒的体积变化率($\mathrm{m^3/s}$)；而离散形式冷凝/蒸发表达式中，冷凝/蒸发事件是由于冷凝单体在颗粒表面生长/消融而引起的，可以认为此时的表面生长/消融事件类似于冷凝单体与某颗已存在颗粒的凝并事件，这里 C_{sur}表示冷凝单体的数目浓度($\mathrm{m^{-3}}$)，$D_{\text{sur}}(v,t)$表示冷凝单体在尺度为 v 的颗粒表面的沉积速率($\mathrm{m^3/s}$)，即冷凝单体与尺度为 v 的颗粒的凝并核，认为所有同化学种类的冷凝单体具有相同的体积，即 v_0，这里只考虑单组分系统的表面生长/消融情况；v_{nul}为核体尺度。

方程(1.1)的左边第一项代表颗粒尺度分布函数的时间变化率，方程(1.1)右边为各种物理化学过程导致的颗粒产生源项。在凝并项中，第一部分为生成项，表示尺度为 u(小于 v)的颗粒与尺度为($v-u$)的颗粒凝并而生成尺度为 v 的新颗粒，

系数 1/2 是为了考虑一次凝并事件有两颗颗粒参加；第二部分为消亡项，表示尺度为 v 的颗粒与其他任何颗粒凝并而形成新的更大尺度颗粒。破碎项中，第一部分为生成项，表示尺度为 u（大于 v）的母颗粒破碎产生尺度为 v 的子颗粒，第二部分为消亡项，表示尺度为 v 的母颗粒破碎产生更小尺度颗粒。

PBE 是一个典型的部分积分微分方程，尽管其数学描述能够建立起来，但是这个方程仅仅对于极少数特殊核模型才存在理论分析解；而且，采用普通的数值方法（如有限差分法、有限体积法等）直接对其进行数值求解也极为困难，需要消耗大量的计算机时间和计算机内存。另外，对于多分散性（宽筛分）的颗粒群而言，在高维相空间的积分微分较为困难；加上各种机理对尺度分布函数的非线性影响各异，这些更使得 PBE 的数值求解成为一个难点。目前国际上最常见的零维单变量 PBE 数值方法主要有矩方法（method of moments，MOM）、分区法（the sectional method）和 Monte Carlo（MC）方法等。

矩方法是描述颗粒尺度分布函数的矩的演变过程的方法。连续形式的颗粒尺度分布函数的 m 阶矩定义为 $M_m = \int_v v^m n(v,t)\mathrm{d}v$。通过引入颗粒尺度分布函数的矩，把 PSDF 的部分积分微分的控制方程转化为几个 PSDF 的低阶矩的普通差分方程，联立求解这些方程即可得到 PSDF 的低阶矩的时间演变过程，然后利用这些低阶矩重建而得到 PSDF 的时间演变过程。矩方法的关键问题是模型封闭和颗粒尺度分布的重建。

分区法[69]把颗粒尺度分布曲线进行离散，划分为有限数目的 m 个区间（section 或 bin），认为每个区间内颗粒尺度谱满足一个统一的分布函数（如假设每个区间内为单分散性分布），在每个区间内针对某个颗粒属性的分布函数，建立平衡方程[69]，联立求解这些平衡方程，可以得到某个颗粒属性的分布函数随时间的演变过程。离散法（the discrete method）[70]和离散-分区法（the discrete-sectional method）[71]实际上也可视为特殊的分区法，区别在于区间划分的方法。分区法的关键问题在于克服高度复杂的模型所带来的计算和编程压力。

矩方法和分区法都是基于欧拉体系来直接求解 PBE，一般需要对颗粒尺度分布进行离散或限制初始颗粒尺度分布的形式。而 Monte Carlo 方法有着天生的离散特性，正好与所研究系统的离散本质（包括离散的颗粒和离散的动力学事件等）不谋而合，它与颗粒群平衡方程具有同样的假设（分子混沌和颗粒稀疏假设），通过直接描述离散系统的动力学演变过程来间接求解 PBE，作为一种基于拉格朗日体系的随机性方法，其优点是能得到颗粒轨道经历效应和历史效应，从而能得到颗粒动力学演变过程的细节信息，算法相对简单而易于编程实现，这些正是以上几种基于欧拉体系的确定性方法的主要缺点。它的关键问题在于解决统计噪声和降低计算代价。

其他一些较为新奇的数值方法，如类方法(the method of classes)[64,72][包括并行子母类方法(the parallel parent and daughter classes technique)[73]]、容积平均法(the cell average technique)[74]、谱方法(the spectral method)[75][包括最小二乘谱方法(the least-squares spectral method)[76]]、有限元法(the finite element method)[77,78]、有限体积法(the finite volume method)[79]、有限差分法(the finite difference method)[80,81]、小波法(the wavelet-based method)[82]、熵方法(the entropy model)[83]等，主要思想均是采用各种数学工具和巧妙的数学技巧把积分微分方程离散为一系列的普通差分方程，算法本身内在的复杂性和狭隘性是它们的主要缺点。

1.3.2 多维颗粒群平衡模拟

零维 PBM 以零维空间系统中颗粒尺度分布的时间演变过程为描述目标，实际上，获得颗粒尺度分布函数的时间和空间演变的详细信息对于精确描述离散系统的动力学演变过程、精确控制离散系统的动力学演变过程、优化操作条件、揭示复杂系统动力学演变的内部机理和规律、实验设计、模型参数辨识等更为重要。如研究流态化系统时，需要描述离散颗粒在碰撞、团聚、破碎等事件控制下所形成的非均匀结构，以便于流化控制、改进反应器设计和优化操作条件等；各种动力学事件的核模型通常受两相流场结构所控制(如颗粒局部富集效应和湍流输运效应可以使得局部凝并速率超过平均值 10 倍以上[24])，即核模型表现出强烈的空间关联性，所以准确描述颗粒动力学演变过程必须考虑颗粒尺度分布的空间非均匀性。正是由于这些现实而极富挑战性的科学和工程需求，从 20 世纪 90 年代以来，多维 PBM 迅速成为诸多领域的研究热点，从发表的文献分析，这种研究格局在 21 世纪初期达到了高潮并必将继续持续下去。

基于零维 PBM 实现多维 PBM 是一项复杂的研究任务。欧拉坐标体系下的颗粒尺度分布函数在多维空间系统中的守恒方程(多维颗粒群平衡方程)如下[84]：

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial n(\boldsymbol{x},v,t)}{\partial t}+\boldsymbol{u}_{\mathrm{c}}(t)\,\frac{\partial n(\boldsymbol{x},v,t)}{\partial \boldsymbol{x}}\\
&=\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}}\left[D\,\frac{\partial n(\boldsymbol{x},v,t)}{\partial \boldsymbol{x}}\right]+n(\boldsymbol{x},v,t)\,\frac{\partial[\boldsymbol{u}_{\mathrm{d}}(v,t)-\boldsymbol{u}_{\mathrm{c}}(t)-\boldsymbol{a}]}{\partial \boldsymbol{x}}\\
&\quad+\left\{\frac{1}{2}\int_{v_{\min}}^{v}\beta(\boldsymbol{x},v-u,u,t)\,n(\boldsymbol{x},v-u,t)\,n(\boldsymbol{x},u,t)\,\mathrm{d}u\right.\\
&\quad\left.-\,n(\boldsymbol{x},v,t)\int_{v_{\min}}^{v_{\max}}\beta(\boldsymbol{x},v,u,t)\,n(\boldsymbol{x},u,t)\,\mathrm{d}u\right\}_{\text{凝并}}
\end{aligned}
$$

$$+\left\{\int_{v}^{v_{\max}}\gamma(\boldsymbol{x},u,v,t)b(\boldsymbol{x},u,t)S(\boldsymbol{x},u,t)n(\boldsymbol{x},u,t)\mathrm{d}u-S(\boldsymbol{x},v,t)n(\boldsymbol{x},v,t)\right\}_{\text{破碎}}$$
$$-\left\{\left[\frac{\partial(I(\boldsymbol{x},v,t)n(\boldsymbol{x},v,t))}{\partial v}\right]\Bigg\|\begin{bmatrix}C_{\mathrm{s}}(\boldsymbol{x},t)D_{\mathrm{s}}(\boldsymbol{x},v-v_0,t)n(\boldsymbol{x},v-v_0,t)\\-C_{\mathrm{s}}(\boldsymbol{x},t)D_{\mathrm{s}}(\boldsymbol{x},v,t)n(\boldsymbol{x},v,t)\end{bmatrix}\right\}_{\text{冷凝/蒸发}}$$
$$+\{J(\boldsymbol{x},v,t)\delta(v_{\mathrm{nul}},v)\}_{\text{成核}}-\{E(\boldsymbol{x},v,t)n(\boldsymbol{x},v,t)\}_{\text{沉积}}+\{R_{\mathrm{chemical}}\}+\{R_{\mathrm{other}}\}\tag{1.2}$$

式中：$\boldsymbol{x}$ 为空间位置矢量；$n(\boldsymbol{x},v,t)$ 为时间和空间相关联的颗粒尺度分布函数；$n(\boldsymbol{x},v,t)\mathrm{d}v$ 表示时刻 t、位置 $\boldsymbol{x}$ 处、尺度范围在 $v\sim v+\mathrm{d}v$ 内的颗粒在单位体积内的数目浓度；$\boldsymbol{u}_{\mathrm{c}}$、$\boldsymbol{u}_{\mathrm{d}}$ 分别为连续相（一般为气流）和离散相（泛称为颗粒）的速度；D 为 Fick 扩散系数；$\boldsymbol{a}$ 为由外部作用力引起的颗粒迁移速度。凝并核、破碎核、成核核、冷凝/蒸发核和沉积核等均随时间和空间而变化。

显然，此时颗粒相各种平衡方程的源项将非常复杂，且难以数值求解，利用矩方法、分区法等欧拉方法（或称为确定性方法）与描述两相湍流场的数值方法耦合起来是可行的解决方案。即使如此，对于多分散性颗粒群系统、对于同时发生的多个颗粒动力学事件，需要考虑颗粒各种动力学事件（碰撞、凝并、破碎等）——也就是考虑四向耦合（four-ways coupling）的多相湍流模型——仍然存在太多的难点。对于一些细微颗粒系统和稀释颗粒系统而言，可以认为颗粒对流体的轨道跟踪性好，对流场的影响也较小，可以不考虑颗粒相湍流运动，而把重点集中在颗粒尺度分布函数的时空演变。此时方程(1.2)右边第二项可以忽略，通过联立求解气相湍流的数值方法和零维颗粒群平衡模拟的数值方法，可以得到颗粒尺度分布的时空演变过程，并以此来量化离散系统的动力学演变过程。

但是，为了更精确描述颗粒尺度分布的时空演变，对于较大尺度或者（局部）非均匀浓度和结构的颗粒群，考虑颗粒场以及四向耦合是必要的，此时整体模型的复杂性大大增强，这方面的研究还相当少。

1.4 本书的主要结构

离散系统动力学演变以及颗粒群平衡模拟在国内还属于较新的概念，本书即致力于介绍颗粒群平衡模拟的基础知识、基本概念和最新的研究进展，特别是作者近几年来在核模型、数值方法和复杂系统应用等方面所进行的工作。颗粒群平衡模拟既可以作为一种单独的数值模拟手段来研究离散系统的动力学演变过程，也可以与多相流模型耦合起来，考虑离散相-离散相、离散相-连续相间的相互作用（即考虑四向耦合效应），包括离散单元的碰撞、聚并、破碎以及相变等关键热点，从而推动了多相流研究从单一的工程视野向更为科学的定量细节描述和精确控制优

化的高度转变。从这个角度来说，颗粒群平衡模拟与四向耦合多相湍流模型有着千丝万缕的联系，甚至可以这么认为，从某种角度来看，多维颗粒群平衡模拟即为四向耦合多相湍流模型的一部分。所以，本书的研究对象是离散系统，研究目标是离散系统动力学演变过程的定量描述和数值模拟，主线是颗粒群平衡模拟，重点是颗粒群平衡模拟的数值方法，特别是 Monte Carlo 方法。本书主要介绍单变量颗粒群平衡模拟，后面不再强调。

本书的结构如下组织：

在本章绪论提出问题之后，第 2 章主要对颗粒群平衡模拟的动力学事件的核模型进行专门介绍，包括我们基于直接数值模拟所提出的一个考虑湍流输运效应和局部富集效应的有限惯性小颗粒湍流碰撞核的半经验模型。核模型是颗粒群平衡模拟中相当重要的研究内容，进行颗粒群平衡模拟，必须首先获取所模拟的实际离散系统的各种动力学事件核模型，当数值方法的问题解决之后，能否准确描述离散系统的动力学演变过程主要取决于核模型。

第 3 章以零维颗粒群平衡方程为求解目标，对目前主流的几种颗粒群平衡模拟数值方法进行了详细的介绍，包括矩方法、分区法、Monte Carlo 方法等，这些方法各有其优缺点，有各自的生存土壤。

第 4 章主要介绍作者所发展的 Monte Carlo 方法，此时仍然以最基础的零维颗粒群平衡模拟为对象。分别介绍了基于时间驱动的多重 Monte Carlo 算法和基于事件驱动的事件驱动常体积法。然后接着介绍了作者所建立的 Monte Carlo 方法定量评判准则，以及在此准则下对几种 Monte Carlo 方法的定量比较和定性分析。这种定量比较有利于发现 Monte Carlo 方法本身的误差来源和计算代价的主要贡献源，从而可以针对性地对各种 Monte Carlo 方法进行评价和改进。

第 5 章则介绍多维颗粒群平衡模拟，包括采用基于欧拉体系的确定性方法（特别是矩方法、分区法和离散分区法）和基于拉格朗日体系的随机性方法（主要是时间驱动的多重 Monte Carlo 算法）进行多维颗粒群平衡模拟。由于多维颗粒群平衡模拟涉及两相湍流场，本章也对稀疏气固两相流的雷诺应力-拉格朗日 PDF 模型进行了简单介绍。

第 6 章主要介绍颗粒群平衡模拟在实际离散系统中的应用。首先介绍如何分别利用多重 Monte Carlo 算法和事件驱动常体积法描述自然环境中气溶胶颗粒湿沉降和紧凑型混合颗粒收集器对燃煤锅炉飞灰颗粒的脱除过程，此时实际上是进行零维颗粒群平衡模拟，然后介绍了多重 Monte Carlo 算法描述气固两相流中的颗粒碰撞，并探讨颗粒碰撞对两相湍流场的影响，这实际上是进行多维颗粒群平衡模拟。最后对颗粒群平衡模拟的发展趋势和应用领域进行展望。

参考文献

[1] 周力行. 多相湍流反应流体力学. 北京：国防工业出版社，2002.
[2] 陈斌，郭烈锦，杨晓刚. 管束间复杂区域流场的离散涡数值模拟. 自然科学进展，2003，13(1)：74—78.
[3] 张兆顺. 湍流. 北京：国防工业出版社，2002.
[4] 是勋刚. 湍流. 天津：天津大学出版社，1994.
[5] 任凯锋，张会强，王希麟. 获得空间发展槽道流动大涡模拟入口条件的最不稳定波方法. 清华大学学报(自然科学版)，2006，46(8)：1470—1472.
[6] 刘欢鹏，王淑彦，陆慧林，等. DSMC-LES方法研究循环流化床内颗粒团聚物的流动特性. 化工学报，2005，56(7)：1197—1205.
[7] 张健，何国威，陆利蓬，等. 大涡模拟中条件滤波耗散和扩散的统计特性. 力学学报，2006，38(4)：433—437.
[8] Fan J R，Luo K，Ha M Y，et al. Direct numerical simulation of a near-field particle-laden plane turbulent jet. Physical Review E，2004，70 (2)：026303.
[9] 贺铸. 非等温气固两相各向同性湍流的直接数值模拟[博士学位论文]. 武汉：华中科技大学，2006.
[10] 郭照立，郑楚光，李青，等. 流体动力学的格子Boltzmann方法. 武汉：湖北科学技术出版社，2002.
[11] 李静海，欧阳洁，高士秋，等. 颗粒流体复杂系统的多尺度模拟. 北京：科学出版社，2005.
[12] 周力行. 湍流气粒两相流动和燃烧的理论与数值模拟. 北京：科学出版社，1994.
[13] 郭烈锦. 两相与多相流体动力学. 西安：西安交通大学出版社，2002.
[14] 张政，谢灼利. 流体-固体两相流的数值模拟. 化工学报，2000，52(1)：1—11.
[15] 袁竹林，徐益谦. 从软球、硬球模型探讨颗粒自转对流化状态的影响. 工程热物理学报，2001，22(3)：885—896.
[16] 欧阳洁，李静海. 确定性颗粒轨道模型在流化床模拟中的研究进展. 化工学报，2004，55(10)：1581—1592.
[17] Lun C K K. Numerical simulation of dilute turbulent gas-solid flows. International Journal of Multiphase Flow，2000，26(10)：1707—1736.
[18] Wang L P，Wexler A S，Zhou Y. Statistical mechanical descriptions of turbulent coagulation. Physics of Fluids，1998，10 (10)：2647—2651.
[19] Abrahamson J. Collision rates of small particles in a vigorously turbulent fluid. Chemical Engineering Science，1975，30(11)：1371—1379.
[20] William J J E，Crane R I. Particle collision rate in turbulent flow. International Journal of Multiphase Flow，1983，9(4)：421—435.
[21] Yuu S. Collision rate of small particles in a homogeneous and isotropic turbulence. AIChE Journal，1984，30(5)：802—807.

[22] Kruis F E, Kusters K A. The collision rate of particles in turbulent flow. Chemical Engineering Communications, 1997, 158(1): 201—230.

[23] Zhou Y, Wexler A S, Wang L P. On the collision rate of small particles in isotropic turbulence. II. Finite inertia case. Physics of Fluids, 1998, 10(5): 1206—1216.

[24] Wang L P, Wexler A S, Zhou Y. Statistical mechanical description and modelling of turbulent collision of inertial particles. Journal of Fluid Mechanics, 2000, 415: 117—153.

[25] Wang L P, Wexler A S, Zhou Y. On the collision rate of small particles in isotropic turbulence. I. Zero-inertia case. Physics of Fluids, 1998, 10(1): 266—276.

[26] Sundaram S, Collins L R. Collision statistics in an isotropic particle-laden turbulent suspension. Part I: Direct numerical simulations. Journal of Fluid Mechanics, 1997, 335: 75—109.

[27] Mei R, Hu K C. On the collision rate of small particles in turbulent flows. Journal of Fluid Mechanics, 1999, 391: 67—89.

[28] Alipchenkov V M, Zaichik L I. Particle collision rate in turbulent flow. Fluid Dynamics, 2001, 36(4): 608—618.

[29] Brunk B K, Koch D L, Lion L W. Hydrodynamic pair diffusion in isotropic random velocity fields with application to turbulent coagulation. Physics of Fluids, 1997, 9(9): 2670—2691.

[30] Jonas P R, Goldsmith P. The collection efficiencies of small droplets falling through a sheared air flow. Journal of Fluid Mechanics, 1972, 52: 593—608.

[31] Koziol A S, Leighton H G. The effect of turbulence on the collision rates of small cloud drops. Journal of the Atmospheric Sciences, 1996, 53(13): 1910—1920.

[32] Klett J D, Davis M H. Theoretical collision efficiencies of cloud droplets at small Reynolds numbers. Journal of the Atmospheric Sciences, 1973, 30(1): 107—118.

[33] Delichatsios M A. Particle coagulation in steady turbulent flows: application to smoke aging. Journal of Colloid and Interface Science, 1980, 78(1): 163—174.

[34] Brunk B K, Koch D L, LW L. Turbulent coagulation of colloidal particles. Journal of Fluid Mechanics, 1998, 364: 81—113.

[35] Brunk B K, L K D, Lion L W. Observations of coagulation in isotropic turbulence. Journal of Fluid Mechanics, 1998, 371: 81—107.

[36] Zinchenko A Z, Davis R H. Collision rates of spherical drops or particles in a shear flow at arbitrary Peclet number. Physics of Fluids, 1995, 7(10): 2310—2327.

[37] Lockwood F C, Yousif S. A model for the particulate matter enrichment with toxic metals in solid fuel flames. Fuel Processing Technology, 2000, 65—66(1): 439—457.

[38] 马重芳，袁修干，杨春信，等. 珠状凝结换热的数学物理模型及数值模拟. 计算物理，2001, 18(4): 334—340.

[39] Litster J D. Scaleup of wet granulation processes: science not art. Powder Technology, 2003, 130 (1-3): 35— 40.

[40] Seinfeld J H, Pandis S N. Atmospheric Chemistry and Physics. New York: Wiley, 1998.
[41] Friedlander S K. Smoke, Dust and Haze: Fundamentals of Aerosol Behavior. New York: Wiley, 1997.
[42] 樊建人，岑可法. 工程气固多相流动的理论及计算. 杭州：浙江大学出版社，1990.
[43] Sinclair J L, Jackson R. Gas-particle flow in a vertical pipe with particle-particle intercation. AIChE Journal, 1989, 35(5): 1473—1486.
[44] Gidaspow D. Multiphase Flow and Fluidization: Continuum and Kinetic Theory Description. Boston: Academic Press, 1994.
[45] Nieuwland J J, Annaland M V, Kuipers J A M, et al. Hydrodynamic modeling of gas/particle flows in riser reactors. AIChE Journal, 1996, 42(6): 1569—1582.
[46] 周芳，祁海鹰，由长福，等. 有限空间风沙流动数值模拟及边界条件问题. 清华大学学报（自然科学版），2004, 44(8): 1079—1082.
[47] 万晓涛，郑雨，魏飞，等. 循环流化床提升管气固湍流的计算流体力学模拟——k-ε-k_p-ε_p-Θ 5参数双流体模型. 化工学报，2002, 53(5): 461—468.
[48] Balzer G. Gas-solid flow modelling based on the kinetic theory of granular media: Validation, applications and limitations. Powder Technology, 2000, 113(3): 299—309.
[49] 曾卓雄，周力行，张健. 用颗粒相双尺度二阶矩湍流模型模拟突扩两相流动. 西安交通大学学报，2006, 40(1): 97—100.
[50] Zhang X, Zhou L. A second-order moment particle-wall collision model accounting for the wall roughness. Powder Technology, 2005, 159(2): 111—120.
[51] 柳朝晖. 湍流气粒两相流的SOM-PDF输运方程模型和PDPA实验研究[博士学位论文]. 武汉：华中科技大学，2002.
[52] Reade W C, Collins L R. A numerical study of the particle size distribution of an aerosol undergoing turbulent coagulation. Journal of Fluid Mechanics, 2000, 415: 45—64.
[53] 刘敏，张会强，郭印诚，等. 稠密气固流动中的格子-确定性轨道模型. 清华大学学报（自然科学版），2003, 43(2): 246—249.
[54] Tsuji Y, Tanaka T, Yonemura S. Cluster patterns in circulating fluidized beds predicted by numerical simulation (discrete particle model versus two-fluid model). Powder Technology, 1998, 95(3): 254—264.
[55] 张鑑，由长福，徐旭常. 循环床内气固两相流中稠密颗粒间碰撞的数值模拟. 工程热物理学报，1998, 19(2): 256—260.
[56] 樊建人，姚军，张新育，等. 气固两相流中颗粒-颗粒随机碰撞新模型. 工程热物理学报，2001, 22(5): 629—632.
[57] Sommerfeld M. Validation of a stochastic Lagrangian modelling approach for inter-particle collisions in homogeneous isotropic turbulence. International Journal of Multiphase Flow, 2001, 27(10): 1829—1858.
[58] Haviland J K, Lavin M L. Application of the Monte Carlo method to heat transfer in a rarified gas. Physics of Fluids, 1962, 5(11): 1399—1405.

[59] Vlasov V I. Improvement of the method of statistical trials (Monte Carlo) for calculation of rarefied gases flows. Doklady Akademii Nauk SSSR,1966,167(5): 1016—1018.

[60] Pai S I. Fundamental equations of a mixture of a gas and small spherical solid particles from simple kinetic theory. Journal of Mathematical and Physical Sciences,1973,7(3): 1—15.

[61] Kitron A,Elperin T,Tamir A. Monte Carlo simulation of gas-solids suspension flows in impinging streams reactors. International Journal of Multiphase Flow, 1990, 16(1): 1—17.

[62] Tsuji Y. Activities in discrete particle simulation in Japan. Powder Technology,2000,113(3): 278—286.

[63] Ho C A,Sommerfeld M. Modelling of micro-particle agglomeration in turbulent flows. Chemical Engineering Science,2002,57(15): 3073—3084.

[64] Ramkrishna D. Population Balances: Theory and Applications to Particulate Systems in Engineering. San Diego: Academic Press,2000.

[65] Vikhansky A,Kraft M. Modelling of a RDC using a combined CFD-population balance approach. Chemical Engineering Science,2004,59(13): 2597—2606.

[66] Vikhansky A,Kraft M. Single-particle method for stochastic simulation of coagulation processes. Chemical Engineering Science,2005,60(4): 963—967.

[67] Hounslow M J. Population balance modelling of particulate systems. Chemical Engineering Science,2002,57(12): 2123.

[68] Smoluchowski M V. Versuch einer mathematischen Theorie der Koagulationskinetik kolloider Losungen. Zeitschrift für Physikalische Chemie,1917,92: 129—134.

[69] Gelbard F,Tambour Y,Seinfeld J H. Sectional representations for simulating aerosol dynamics. Journal of Colloid and Interface Science,1980,76(2): 541—556.

[70] Landgrebe J D,Pratsinis S E. Gas-phase manufacture of particulate: Interplay of chemical reaction and aerosol coagulation in the free-molecular regime. Industrial & Engineering Chemistry Research,1989,28(10): 1474—1481.

[71] Wu J J,Flagan R C. A discrete-sectional solution to the aerosol dynamic equation. Journal of Colloid and Interface Science,1988,123(2): 339—352.

[72] Alopaeus V,Laakkonen M,Aittamaa J. Solution of population balances with breakage and agglomeration by high-order moment-conserving method of classes. Chemical Engineering Science,2006,61(20): 6732—6752.

[73] Bove S,Solberg T,Hjertager B H. A novel algorithm for solving population balance equations: The parallel parent and daughter classes. Derivation,analysis and testing. Chemical Engineering Science,2005,60(5): 1449—1464.

[74] Kumar J,Peglow M,Warnecke G,et al. Improved accuracy and convergence of discretized population balance for aggregation: The cell average technique. Chemical Engineering Science,2006,61(10): 3327—3342.

[75] Mantzaris N V, Daoutidis P, Srienc F. Numerical solution of multi-variable cell population balance models. II. Spectral methods. Computers and Chemical Engineering, 2001, 25 (11-12): 1441—1462.

[76] Dorao C A, Jakobsen H A. Application of the least-squares method for solving population balance problems in R^{d+1}. Chemical Engineering Science, 2006, 61(15): 5070—5081.

[77] Roussos A I, Alexopoulos A H, Kiparissides C. Part III: Dynamic evolution of the particle size distribution in batch and continuous particulate processes: A Galerkin on finite elements approach. Chemical Engineering Science, 2005, 60(24): 6998—7010.

[78] Mantzaris N V, Daoutidis P, Srienc F. Numerical solution of multi-variable cell population balance models. III. Finite element methods. Computers and Chemical Engineering, 2001, 25(11-12): 1463—1481.

[79] Qamar S, Warnecke G. Solving population balance equations for two-component aggregation by a finite volume scheme. Chemical Engineering Science, 2007, 62(3): 679—693.

[80] Lim Y I, Lann J-M L, Meyer X M, et al. On the solution of population balance equations (PBE) with accurate front tracking methods in practical crystallization processes. Chemical Engineering Science, 2002, 57(17): 3715—3732.

[81] Mantzaris N V, Daoutidis P, Srienc F. Numerical solution of multi-variable cell population balance models: I. Finite difference methods. Computers and Chemical Engineering, 2001, 25(11-12): 1411—1440.

[82] Liu Y, Cameron I T. A new wavelet-based method for the solution of the population balance equation. Chemical Engineering Science, 2001, 56(18): 5283—5294.

[83] Otwinowski H. Energy and population balances in comminution process modelling based on the informational entropy. Powder Technology, 2006, 167(1): 33—44.

[84] 赵海波，郑楚光，柳朝晖，等. 燃煤锅炉 PM 微尺度流体力学研究模型初探. 华中科技大学学报(自然科学版)，2003，31(11)：72—75.

2　典型动力学事件的核模型

要对离散系统进行颗粒群平衡模拟以定量揭示其动力学演变过程，必须具备两个基本因素：准确的动力学事件核模型和合适的颗粒群平衡方程的数值方法。在颗粒群平衡模拟中，所有影响离散系统动力学演变过程的内在机制被囊括进各种事件的核(kernel)模型中，这些核的物理意义即这些事件的发生速率。即使在忽略诸多次要因素的前提下，核模型也是非常复杂的，以至于在很多情况下无法采用确定的数学关系式来表达。本章介绍一些基本的动力学事件的核模型，重点是碰撞、凝并、冷凝/蒸发、成核、沉积等。这些内容是颗粒群平衡模拟的基础知识，且目前仍有大量关于核模型的研究在进行，本章除了介绍这方面的经典理论和方法之外，还尽量涉猎最新的研究进展，包括我们所提出的一个考虑湍流输运效应和局部富集效应的有限惯性小颗粒湍流碰撞核的半经验模型。

2.1　碰　　撞

2.1.1　基础知识

此处所述碰撞是指几何碰撞(geometric collision)，即两颗粒在同一时刻理论上轨道发生交叉。几何碰撞率(geometric collision rate)表征颗粒因为轨迹交叉在单位时间单位体积内发生碰撞的次数，单位为 $m^{-3} \cdot s^{-1}$。几何碰撞率(或平均碰撞率)的数学计算公式为

$$N_{c,ij} = \beta_{ij} n_i n_j \tag{2.1}$$

式中：n_i是离散系统中尺度为v_i的第 i 种颗粒的数目浓度(m^{-3})；β_{ij}为碰撞核函数。

对于单分散系统，几何碰撞率一般表达为

$$N_{c,ii} = \frac{1}{2}\beta_{ii} n^2 \tag{2.2}$$

式中：n 为离散系统中颗粒数目浓度。

$$n = \frac{N_p}{V}$$

式中：N_p 为实际颗粒总数目；V 为离散系统的体积。

Hu 和 Mei[1]则考虑了离散系统中仅仅只存在两颗颗粒时的极端碰撞情况，认

为应当把公式(2.2)修正为

$$N_{c,ii} = \frac{1}{2}\beta_{ii}\frac{N_p(N_p-1)}{V^2} = \frac{1}{2}\beta_{ii}n\left(n-\frac{1}{V}\right) \tag{2.3}$$

碰撞核的物理意义是离散系统所在计算区域内发生碰撞事件的速率(或称为单位时间内发生碰撞事件的概率),单位为 m^3/s。Saffman 和 Turner[2] 首次在碰撞球(collision sphere)概念基础上提出了精确的零惯性颗粒的几何碰撞核(β)模型,同时也提出了基于圆柱模式(cylindrical formulation)和圆球模式(spherical formulation)的碰撞核计算方法。

圆球模式如图 2.1(a)所示,它采用如下方法估计碰撞核函数:将发生碰撞的颗粒对的其中一个固定在移动的坐标系统的原点,以颗粒对的半径之和 R(碰撞半径,$R=r_i+r_j$,r_i和 r_j分别为两颗粒 i 和 j 的半径)为半径作"碰撞球",此即两颗粒的有效碰撞区域。对于零惯性颗粒(细微颗粒)而言,完全追随流体运动,如果两颗粒均进入其有效碰撞区域,则必然有碰撞事件发生,所以,依据碰撞核的定义,此时流入某对颗粒的有效碰撞域内的流体的平均流量即为该对颗粒的碰撞核。该流量与该颗粒对的径向相对速度 w_r相关。

$$w_r = \frac{\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{R}}{R}$$

式中:$\boldsymbol{w}$ 为颗粒对的相对速度(矢量);$\boldsymbol{R}$ 为碰撞半径的径向矢量(separation vector);$R=|\boldsymbol{R}|$。

负的径向相对速度 w_r^- 表明颗粒对间距减小,正的径向相对速度 w_r^+ 表明颗粒对间距增大。于是,碰撞核等于 w_r^- 在半径为 R 的碰撞球表面 S 的积分值,即

$$\beta^{sph} = -\oint_S w_r^- \,dS \tag{2.4}$$

对于不可压缩流动,流体满足连续性方程,即

$$\oint_S w_r^+ \,dS + \oint_S w_r^- \,dS = 0 \tag{2.5}$$

所以圆球模式下的碰撞核可如下计算:

$$\beta^{sph} = -\oint_S w_r^- \,dS = \oint_S w_r^+ \,dS = \frac{1}{2}\oint_S |w_r|\,dS \tag{2.6}$$

对于均匀各向同性湍流,碰撞核函数即等于圆球表面积的一半乘以平均径向相对速度。

$$\beta^{sph} = 2\pi R^2\langle|w_r|\rangle \tag{2.7}$$

式中:$\langle\rangle$代表在空间($\boldsymbol{R}$ 的所有方向和空间坐标)和时间(数值模拟中的时间步长)坐标上进行统计平均。

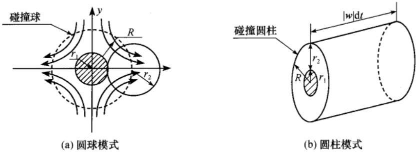


图 2.1 圆球模式和圆柱模式示意图

值得注意的是，圆球模式的一个重要假设就是相对速度 $\boldsymbol{w}$ 是不可压缩的，即认为流入球形有效碰撞区域的流量等于流出的流量。根据式(2.7)，对圆球模式下碰撞核模型的研究主要集中在如何准确描述发生碰撞的颗粒对的径向相对速度这一焦点上。

与圆球模式不同的是，圆柱模式的有效碰撞区域是一个高为 $|\boldsymbol{w}|$，截面积为 πR^2 的圆柱区域(碰撞圆柱)，如图 2.1(b)所示。其潜在假设是：任何时刻相对速度 $\boldsymbol{w}$ 在量度为 R 的空间范围内是局部均匀的。当然在实际湍流中，这种假设是不成立的，但是也是目前较为可行的或不得已而为之的假设。采用与圆球模式类似的推导方法，得到圆柱模式下碰撞核如下：

$$\beta^{\text{cyl}} = \pi R^2 \langle |\boldsymbol{w}| \rangle \tag{2.8}$$

根据式(2.8)，对圆柱模式下碰撞核模型的研究主要集中在颗粒对的相对速度。

对于零惯性颗粒的碰撞核，Saffman 和 Turner[2] 分别运用圆球模式和圆柱模式得到了不同的碰撞核表达式，他们把这种差异归结为在两种模式中所采用的相对速度 $\boldsymbol{w}$ 的概率密度函数形式不同。而 Wang 等通过直接数值模拟[3] 和理论分析[4] 表明，对于均匀各向同性湍流和简单剪切流中的零惯性颗粒而言，圆球模式的碰撞核公式能给出比较精确的结果，而圆柱模式的碰撞核公式的结果超出精确值 20%以上。所以，虽然两种模式在描述随机分子运动和重力作用下的碰撞率时能够给出相同的表达式[4]，仍然建议采用圆球模式来描述湍流碰撞核，特别是对于那些惯性较小的细微颗粒，如可吸入颗粒物和大气气溶胶等。

碰撞核模型非常复杂，主要是由于导致颗粒发生碰撞的因素非常复杂，通常来说，布朗扩散、重力、湍流曳力、虚假质量力、热泳力、范德华力、各种外加场力如静电力和磁力等，均是促使颗粒之间发生相互作用的因素。在不考虑外力场效应的前提下，一般把各种碰撞现象划分为布朗碰撞和湍流碰撞，即分别由于布朗扩散和湍流作用而引起的碰撞。不同尺度的颗粒、不同惯性的颗粒其布朗碰撞核和湍流

碰撞核存在本质的区别。离散系统中颗粒群一般具有较为宽广的粒径范围，布朗扩散和湍流作用均是碰撞核模型必须考虑甚至必须同时考虑的重要因素。

2.1.2 布朗碰撞核

颗粒的动力学性能常常依赖于颗粒尺度与某些其他特性长度（一般为空气的平均自由程 λ）的比例，Knudsen 数 Kn 可用来表征颗粒和环境气体之间的质量、动量和能量的交换和转移。根据 Allen 和 Raabe[5]，空气的平均自由程 λ 的算式为

$$\lambda = \lambda_0 \frac{p_0}{p}\left(\frac{T}{T_0}\right)^2 \frac{T_0 + T_s}{T + T_s} \tag{2.9}$$

式中：$T_0 = 296.15\text{K}$；$p_0 = 1.013\times10^5\text{Pa}$；$\lambda_0$ 为常温常压下空气中分子的平均自由程，一般取 67.3nm；$T_s = 110.4\text{K}$；T 为环境气体绝对温度。

一般来说，根据颗粒的 Kn 数不同可以将颗粒分为自由分子区（free molecular regime）、过渡区（transition regime）、近连续区（或称为滑流区，slip flow regime）和连续区（continuum regime）。

1）自由分子区

常压下处于自由分子区的颗粒直径一般为纳米级（$Kn>10$），冲撞颗粒表面的绝大多数分子来自主气流，由分子碰撞理论和 Boltzmann 方程，可以算出颗粒与气体之间质量、动量和能量的交换，从而通过对流场中颗粒速度分布进行统计平均可以计算得到碰撞核：

$$\beta_{\text{B}}^{\text{fm}}(u,v) = \pi R^2 \bar{c} = K_{\text{fm}}(u^{1/3} + v^{1/3})^2 \sqrt{\frac{1}{u} + \frac{1}{v}}, \quad K_{\text{fm}} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/6}\left(\frac{6k_{\text{B}}T}{\rho_{\text{p}}}\right)^{1/2} \tag{2.10}$$

式中：u、v 分别为两颗粒的体积；$\bar{c}$ 为气体分子平均热速度（采用气体动理学理论计算）；R 为碰撞半径；K_{fm}为自由分子区的碰撞系数；k_{B}为 Boltzmann 常数；T 为气流绝对温度；ρ_{p} 为颗粒密度；脚标 fm 表示自由分子区域（本书均采用“co”表示连续区，“sf”表示滑流区，“tr”表示过渡区），下脚标 B 表示布朗扩散。

2）连续区和近连续区

常压下处于连续区的颗粒的直径一般为几微米以上（$Kn\leqslant0.1$），此时气体被认为连续介质，且具有颗粒表面处速度为 0 的边界条件，气体分子的运动可采用扩散理论来描述，利用 Navier-Stokes 方程，可以根据 Stokes 准则计算出阻力并进而得到碰撞核，在同样的相对速度下，该阻力比自由分子流动范围内的阻力大得多。常压下处于近连续区（或称为滑流区）的颗粒直径一般为零点几微米到几微米（$0.1<Kn\leqslant1$），此时气体连续假设已经不适用，但是仍然可以扩展气体分子的扩散理论来描述气流，即采用修正的 Stokes 准则来计算阻力，Stokes-Cunningham

修正因子 C_c 被用来考虑颗粒与气体接触面的滑移效应。连续区及近连续区的布朗碰撞核为

$$\beta_{\mathrm{B}}^{\mathrm{co/sf}}(u,v)=4\pi RD=K_{\mathrm{co}}(u^{1/3}+v^{1/3})\left[\frac{C_{\mathrm{c}}(u)}{u^{1/3}}+\frac{C_{\mathrm{c}}(v)}{v^{1/3}}\right]$$
$$K_{\mathrm{co}}=\frac{2k_{\mathrm{B}}T}{3\mu} \tag{2.11}$$

式中：D 为颗粒的扩散系数（根据爱因斯坦关系式计算）；K_{co} 为连续区及近连续区的碰撞系数；对于连续区，Stokes-Cunningham 滑移修正系数 $C_c=1$，对于近连续区，不同研究者[5~7]提出了不同的计算表达式和简化形式，一般 C_c 如下计算[6]：

$$C_{\mathrm{c}}=1+\frac{\lambda}{d_{\mathrm{p}}}\left[2.493+0.84\exp\left(-0.435\,\frac{d_{\mathrm{p}}}{\lambda}\right)\right] \tag{2.12}$$

μ 为气体动力黏度，一般可如下计算[8]：

$$\mu=\mu_{23}\left(\frac{T}{T_0}\right)^{1.5}\frac{T_0+T_{\mathrm{s}}}{T+T_{\mathrm{s}}} \tag{2.13}$$

式中：$\mu_{23}=1.83245\times10^{-5}\,\mathrm{Pa\cdot s}$。

3）过渡区

过渡区介于自由分子区和连续区/近连续区之间（$1<Kn\leqslant10$），常压下处于过渡区的颗粒直径一般为几十纳米到几百纳米之间，此时适合于自由分子区的 Boltzmann 方程和适合于连续区的扩散理论模型均不适用，此时分子间断效应出现，连续介质模型不再适用，必须采用分子动力学描述方法，给理论上处理带来了很大困难，目前尚只能通过调和平均、拟合等办法来得到过渡区的碰撞核。目前存在诸多过渡区碰撞核的模型，基本思路均是基于碰撞系数的概念。Fuchs[9]首先提出了一个碰撞系数的半经验公式，假设在某一特定距离（颗粒的平均自由程）之外，颗粒的输运由包含滑移修正（slip correction）的扩散理论描述；该距离之内则用气体自由分子动力学来描述。在吸收球半径（absorbing sphere radius）处通过通量匹配方法（matching flux）整合扩散理论和分子动力学对颗粒碰撞进行描述，此时过渡区的碰撞核可以通过连续区/近连续区的碰撞核模型附加一个修正因子的形式来描述，如下式所示：

$$\beta_{\mathrm{B}}^{\mathrm{tr}}=\beta_{\mathrm{B}}^{\mathrm{co/sf}}f(Kn) \tag{2.14}$$

经过与 Fuchs[9]、Wright[10]、Park 等[11]提出了不同的 $f(Kn)$ 模型的比较，Otto 等[12]提出了一个简洁并且相对误差较小的 $f(Kn)$ 模型：

$$f(Kn)=\frac{1+Kn_{\mathrm{d}}}{1+2Kn_{\mathrm{d}}+2Kn_{\mathrm{d}}^2}$$
$$Kn_{\mathrm{d}}=\frac{1}{2}\frac{\beta_{\mathrm{B}}^{\mathrm{co/sf}}}{\beta_{\mathrm{B}}^{\mathrm{fm}}} \tag{2.15}$$

值得注意的是，环境温度和环境压力的变化会使得颗粒在不同的区域不断转变。表 2.1 给出了在典型炉膛条件下、不同温度下、不同直径的颗粒的 Kn 数，可知燃煤锅炉产生的可吸入颗粒物（尺度范围一般为 0.08～10μm）贯穿了所有区域。

表 2.1 不同直径的颗粒的 Knudsen 数和区域（温度：300～2000K）

颗粒直径/μm	0.01	0.1	1	10
Kn	10～100	1～10	0.1～1	0.01～0.1
区域	自由分子区	过渡区	近连续区/滑流区	连续区

2.1.3 湍流碰撞核

根据颗粒 Stokes 数（St_K）的大小可以将颗粒分为三类[13]：细微颗粒（fine particles）、有限惯性颗粒（finite-inertia particles）、粗重颗粒（coarse particle）。其中细微颗粒完全随流体流动（$St_K\to 0$）[2]，颗粒的平均碰撞核函数受颗粒与小尺度耗散涡团的相互作用的影响；粗重颗粒惯性极大（$St_K\to\infty$）[14]，颗粒的速度互不相关，类似于稀薄空气中的分子无规则运动；而有限惯性颗粒既受湍流中小尺度耗散涡团的作用又受大尺度含能涡团的作用，同时要考虑不同颗粒间的运动关联。颗粒的 St_K定义为颗粒的弛豫时间尺度与湍流特征时间尺度的比值，对于各向同性湍流，通常取湍流的 Kolmogorov 时间尺度为其特征时间尺度，这样 St_K可以表示为

$$St_K=\frac{\tau_p}{\tau_K}=\frac{\frac{1}{18}\frac{\rho_p}{\rho_f}\frac{d_p^2}{\mu}}{(\nu/\varepsilon)^{1/2}}=\frac{1}{18}\frac{\rho_p}{\rho_f}\left(\frac{d_p}{\eta}\right)^2 \tag{2.16}$$

式中：τ_p 是直径为 d_p、密度为 ρ_p 的颗粒的弛豫时间尺度；ρ_f 为流体的密度；μ 为流体的动力黏度；ν 为流体运动黏度；ε 为湍流耗散率；τ_K 为湍流的 Kolmogorov 时间尺度，η 为湍流的 Kolmogorov 长度尺度[$=(\nu^3/\varepsilon)^{1/4}$]。

1）零惯性颗粒（$St_K\to 0$）

Saffman 和 Turner[2]首次在碰撞球概念（即圆球模式）基础上提出了精确的零惯性颗粒的碰撞核模型。由于零惯性颗粒在湍流场中完全跟随流体运动，其相对运动是由湍流的剪切作用引起的，考虑各向同性湍流，

$$\langle w_r^2\rangle=\langle w_x^2\rangle=R^2\left\langle\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2\right\rangle=\frac{R^2}{15}\frac{\bar{\varepsilon}}{\nu}\equiv\sigma^2 \tag{2.17}$$

式中：$\bar{\varepsilon}$ 为单位质量湍流平均黏性耗散。

假设颗粒径向相对速度 w_r 的分布函数 $P(w_r)$满足 Gaussian 分布，

$$P(w_r) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\langle w_r^2\rangle}}\exp\left(-\frac{w_r^2}{2\langle w_r^2\rangle}\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\exp\left(-\frac{w_r^2}{2\sigma^2}\right) \tag{2.18}$$

因此可得到颗粒径向相对速度的平均值为

$$\langle | w_r | \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |w_r|\ P(w_r)\mathrm{d}w_r = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\langle w_r^2\rangle^{\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\sigma \tag{2.19}$$

结合式(2.7)、式(2.17)和式(2.19)，可以得到圆球模式下零惯性颗粒的湍流碰撞核的正确表达式：

$$\beta_t^0 = 2\pi R^2 \sqrt{\frac{2}{\pi}}\left(\frac{R^2}{15}\frac{\varepsilon}{\nu}\right)^{\frac{1}{2}} = R^3\left(\frac{8\pi}{15}\frac{\varepsilon}{\nu}\right)^{\frac{1}{2}} = 1.294\frac{R^3}{\tau_K} = 1.294\frac{(r_i+r_j)^3}{\tau_K} \tag{2.20}$$

在圆柱模式下，Saffman 和 Turner[2] 研究了考虑重力作用时湍流中小液滴的碰撞现象。他们将引起颗粒间相对速度的变化原因分为三类：跟随湍流运动的剪切作用、由于颗粒惯性不同而导致的加速作用以及重力作用，于是得到弱惯性颗粒在重力作用下的碰撞核公式：

$$\beta_t = 2\sqrt{2\pi}R^2\left[\frac{1}{9}R^2\frac{\bar{\varepsilon}}{\nu} + \left(1-\frac{\rho_f}{\rho_p}\right)^2(\tau_{pi}-\tau_{pj})^2\left\langle\left(\frac{Du}{Dt}\right)^2\right\rangle + \frac{1}{3}\left(1-\frac{\rho_f}{\rho_p}\right)^2(\tau_{pi}-\tau_{pj})^2 g^2\right]^{\frac{1}{2}} \tag{2.21}$$

式中：$\bar{\varepsilon}$ 为平均湍流耗散率；τ_{pi}、τ_{pj} 分别为颗粒 i 和 j 的弛豫时间尺度；g 为重力加速度；$\left\langle\left(\frac{Du}{Dt}\right)^2\right\rangle$ 为耗散范围的湍流涡团加速度（x 方向的流体加速度）。

方程(2.21)右边的[ ]中，第一项表示剪切项，第二项表示加速项，第三项表示重力项。Wang 等[4] 基于圆球模式而修正了该碰撞率表达式：

$$\beta_t^{sp} = 2\sqrt{2\pi}R^2\left[\frac{1}{15}R^2\frac{\bar{\varepsilon}}{\nu} + \left(1-\frac{\rho_f}{\rho_p}\right)^2(\tau_{pi}-\tau_{pj})^2\left\langle\left(\frac{Du}{Dt}\right)^2\right\rangle + 2\left(1-\frac{\rho_f}{\rho_p}\right)^2\tau_{pi}\tau_{pj}\left\langle\left(\frac{Du}{Dt}\right)^2\right\rangle\frac{R^2}{\lambda_D^2} + \frac{\pi}{8}\left(1-\frac{\rho_f}{\rho_p}\right)^2(\tau_{pi}-\tau_{pj})^2 g^2\right]^{\frac{1}{2}} \tag{2.22}$$

式中：λ_D 为流体加速的纵向 Taylor 微尺度（the longitudinal Taylor-type microscale of fluid acceleration），可参考文献[15]。

方程(2.22)右边的[ ]中，第一项表示剪切项，已经纠正为正确的圆球表达式；第二项为加速项，保持与圆柱模式下的表达式一致；第三项是新加的耦合项，在某些情况下如单分散性颗粒群系统时显得特别重要（此时将不存在加速项和重力项）[15]；第四项为重力项，纠正了 Saffman 和 Turner[2] 因为采用不恰当的相对速度

w 的概率函数而引起的错误。该模型只考虑了重力作用之间的耦合，而不考虑颗粒所受其他作用力之间相互的耦合，而且该模型也忽略了颗粒场的非均匀结构。

另外，在恒定速度梯度的层流剪切流中，Smoluchowski[16] 推导了无惯性颗粒的碰撞核的模型：

$$\beta = \frac{4}{3}\frac{\partial u_x}{\partial y}R^3 \tag{2.23}$$

式中：$\partial u_x/\partial y=\gamma$，$\gamma$ 为剪切速率（s^{-1}）。

2）极大惯性颗粒（$St_K \to \infty$）

Abrahamson[14] 提出了针对惯性极大的颗粒的湍流碰撞核。他认为由于颗粒惯性太大，气相已经不能对颗粒运动产生影响，并假设颗粒运动是相互独立的，与气体分子类似，应用气体动理学理论和分子混沌假设，忽略重力影响，得到的碰撞核函数见式(2.24)。

$$\beta_t^{\infty} = R^2\left(\frac{16\pi\,\overline{v_p'^2}}{3}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{2.24}$$

式中：v_p' 为颗粒的脉动速度，由颗粒场本身的参数决定。

3）有限惯性颗粒

有限惯性颗粒的碰撞核一直是研究难点。William 和 Crane[17] 首先研究了具有中等惯性颗粒的湍流碰撞核函数。他们利用惯性子区和黏性子区的湍流能谱来描述湍流对颗粒的加速作用，得到了湍流作用下具有不同惯性颗粒的碰撞核函数。但是，他们没有考虑湍流的剪切作用，对颗粒与小尺度涡团之间的相互作用模拟效果不佳，其结果不能与 Saffman 和 Turner[2] 的零惯性颗粒的结果相吻合；Yuu[18] 采用与 Williams 和 Crane[17] 类似的研究方法，同时考虑了湍流对颗粒的剪切作用和加速作用。但是他错误的估计了两个颗粒间的速度相关系数，使得大小相同的颗粒的速度相关系数恒为 1，这样大尺度的含能涡团对颗粒碰撞率的影响为零，就不能与 Abrahamson[14] 推出的粗颗粒碰撞模型吻合。Kruis 和 Kusters[19] 同时考虑湍流对颗粒的剪切作用和加速作用，其中加速作用项只是对 William 和 Crane[17] 的研究结果进行了系数上的修正。同时他们的研究基于圆柱模式，对于惯性较小的细微颗粒，将会得到不正确的结果；Zhou 等[20] 分别探讨小尺度涡团和大尺度涡团的作用，给出了定性上正确但是定量上不一定精确的具有较小惯性和较大惯性颗粒的碰撞核函数。Wang 等[21] 则在 DNS 模拟的计算结果基础上修正了 Kruis 等[19] 的数学模型，提出基于球形模式的颗粒湍流碰撞率模型和经验公式。Alipchenkov 等[13] 提出涵盖任意惯性颗粒的碰撞率的分析性模型，对于湍流作用只考虑两种机制：湍流脉动和颗粒的平均相对运动，而其他的因素如布朗扩散、颗粒间流体的作用以及颗粒间吸引力和排斥力都不考虑。因此，现在还没有哪

一个模型能够较好的模拟任意惯性的颗粒的平均碰撞率，以及推导出细微颗粒(零惯性颗粒)和粗重颗粒(极大惯性颗粒)的平均碰撞率这两种极限值。

上述对有限惯性颗粒碰撞的理论分析都是在 Saffman 和 Turner[2] 提出的湍流剪切作用和加速作用的框架下进行的。另一方面，许多学者参考 Abrahamson[14] 的研究，从分子动理学理论出发，试图模化发生碰撞的颗粒的速度相关函数，从而研究气固两相流动中的颗粒碰撞现象。在这些研究中，主要又分为两类：一类是以 Sommerfeld 为代表的拉格朗日模型方法；一类是以 Simonin 为代表的欧拉模型方法。Sommerfeld[22] 提出基于气体动理学理论的拉格朗日随机碰撞模型，在追踪颗粒时，产生一假想粒子，将假想粒子的脉动速度与颗粒的 St_K 数联系起来，通过产生的随机数来判断是否发生碰撞。随后 Sommerfeld[23] 发现原来的 Sommerfeld 模型[22] 没有考虑颗粒间运动的相关性，导致在 $St_K<10.0$ 时，模型得到的碰撞率远远大于数值模拟的结果。接着 Sommerfeld[24,25] 研究了水平槽道中碰撞效应，讨论了不同颗粒直径、质量载荷和壁面粗糙度下颗粒/壁面碰撞、颗粒/颗粒碰撞以及颗粒输运现象。受碰撞模型适用性的影响，他们的研究仍然主要针对惯性较大的颗粒。Berlemont 等[26,27] 对 Sommerfeld 的模型进行了修正，在流体-颗粒速度相关函数的表达中考虑流体的小尺度与颗粒的相互作用。而欧拉模型方面，Simonin[28] 从双流体模型出发，在颗粒概率密度函数(PDF)方程中添加了碰撞项，类比分子动力学方法，碰撞的影响使用扩散系数来模化。Fede 等[29] 在 Simonin[28] 的基础上修正碰撞模型，基于 Monte Carlo 方法求解流体-颗粒联合 PDF 方程，从而考虑湍流导致的碰撞颗粒的速度相关性对碰撞的影响。然而，无论是基于拉格朗日方法，还是欧拉方法，这些模型的根本出发点是将颗粒类比为分子，只有对较大惯性的颗粒，模型才具有较好的适用性。

上述对湍流作用下有限惯性颗粒碰撞的理论分析本质上是基于随机理论，而随机理论的关键是找出湍流运动中哪个尺度对发生碰撞的颗粒间相对速度的贡献最大。因此，他们的研究通常进行了某种假设或者封闭以得到颗粒间平均相对速度，而在封闭的过程中，多数研究最后又归结到适用于粗颗粒情况的气体动理学理论。显然，对于惯性较小的细颗粒，这样的封闭是不合适的。

上述研究都主要考虑湍流输运效应(turbulent transport effect)对颗粒碰撞核的影响，均基于均匀分布颗粒浓度场的假设。然而，近来的研究发现，即使在各向同性湍流中，有限惯性颗粒的浓度场也是十分不均匀的。随着计算机技术的进步，学者们开始应用直接数值模拟(DNS)方法研究湍流作用下的颗粒碰撞现象，考察局部富集效应(preferential concentration effect)对有限惯性颗粒湍流碰撞核的影响[3,30~35]。局部富集效应的本质是强烈的涡管结构(vortex tube structures)，表征了充分发展湍流的耗散尺度动力学。局部富集效应将产生一个非常不均匀的颗粒数密度场。原因是流场中的强涡旋像离心力的作用一样，将颗粒从涡旋的核心推

向高剪切应力的涡间区域。Wang 和 Maxey[36]最先图示了局部富集现象，Wang 和 Maxey[36]和 Squires 和 Eaton[37]分别通过 DNS 作了证明。Fessler 等[38]也对局部富集现象作了实验观察。当颗粒弛豫时间 τ_p 与 Kolmogorov 时间尺度 τ_K 相当时，颗粒局部富集现象最为明显[36]。因为在单分散系统中，局部的颗粒平均碰撞率与局部的颗粒数密度的平方成正比，颗粒局部富集效应将通过增大局部的颗粒数密度对平均碰撞率产生显著影响。近期的一些数值模拟研究中，就证实在低雷诺数和中等雷诺数的流动中，局部富集效应对颗粒的平均碰撞率有明显的增强[20,30]。

近来 Alipchenkov 和 Zaichik 等[13,39~41]的研究颇受关注。首先，Alipchenkov 和 Zaichik[13]从圆球形式的碰撞率公式出发，假设颗粒的速度、流场的速度以及颗粒间相对速度都服从 Gaussian 分布，将颗粒间相对速度解耦成颗粒自相关项和流场对颗粒的影响项，推导出与 Saffman 和 Turner[2]和 Abrahamson[14]这两种极限情况下——即细微颗粒[2]和粗重颗粒湍流碰撞核[14]——的研究十分吻合的结果。为了分析局部富集效应，Alipchenkov 和 Zaichik[41]从颗粒对的相对速度的概率密度函数的动力学方程出发，分析由于湍流中涡结构与颗粒相互作用而产生的对流、扩散输运，从而提出考虑了局部富集效应的有限惯性颗粒的碰撞模型，但是其模型只能应用于大雷诺数的情况，且显得异常复杂。

Sundaram 和 Collins[30]首先以径向分布函数（radial distribution function）$g(R)$ 的形式将局部富集效应引入到颗粒平均碰撞率的数学模型中。$g(R)$在颗粒稀少不考虑聚集效应的时候值为 1，在数密度较高的场合，数值可超过 100。Zhou 等[20]就得到了 $\tau_p<\tau_K$ 时的以局部颗粒数密度的矩量表示的聚集效应的渐近规则。Wang 等[21]通过 DNS 研究颗粒的平均碰撞率，定量的分析了湍流脉动和聚集效应对颗粒平均碰撞率的影响。在分析聚集效应的影响时，拟合出与颗粒惯性和雷诺数关系的经验公式，没有考虑数密度、颗粒大小和质量负载的影响。Reade 和 Collins[31]通过 DNS 分析聚集效应对平均碰撞率的影响与各流动参数之间的关系，并首次分析了颗粒直径与 $g(R)$的关系。李瑞霞等[42]研究了各向同性湍流中有限惯性颗粒的碰撞率，发现局部富集效应使得 St_K 大约等于 1 的有限惯性颗粒的碰撞率显著加强，而局部富集效应与湍流输运效应的联合作用使得 $St_K\approx3.0$ 的颗粒的碰撞率显著加强，两处的碰撞率均被加强了 30 倍左右。以上 $g(R)$的模型大都是半经验公式，很难在碰撞模型中正确量化局部富集效应，但仍然成为目前少数可用的有限惯性颗粒碰撞核模型。2.1.4 节和 2.1.5 节分别介绍我们利用 DNS 得到的有限惯性小颗粒（$St_K<1$）碰撞核的半经验模型及我们综合文献结果的一个有限惯性颗粒碰撞核的推荐模型。

2.1.4　有限惯性小颗粒($St_K<1$)湍流碰撞核半经验模型

$St_K<1$ 的有限惯性小颗粒在自然界中广泛存在，且在某些领域显得特别重

要，如燃煤锅炉产生的绝大部分飞灰颗粒、燃烧生成的 soot 颗粒、自然界中的大部分气溶胶颗粒等均属于此范畴，这些数目极大的小颗粒具有很大的比表面积，在生成和生长过程中往往吸附有大量的有毒物质如重金属、多环芳烃等，且极容易被呼吸系统吸入而进入到肺泡甚至血液中，对人类健康造成了极大的危害，因此也引起了人们的广泛关注，我们专门针对这种小颗粒利用 DNS 来研究其湍流碰撞核。

1）径向相对速度和径向分布函数在 DNS 中的统计

两相流的直接数值模拟（包括气相 DNS 和考虑碰撞的颗粒相的直接跟踪）可以参照相关文献[42]～[45]，在此暂不介绍。此时，从圆球模式出发，使用可能发生碰撞的颗粒对的径向相对速度的系统平均来表征湍流输运效应；使用可能发生碰撞的颗粒对的径向分布函数来表征局部富集效应，此时碰撞核的估计值 β_t^{est}：

$$\beta_t^{est} = 2\pi R^2 \langle |w_r| \rangle g(R) \tag{2.25}$$

对单分散系统，碰撞半径 R 等于颗粒直径 d_p；$\langle |w_r| \rangle$ 表示可能发生碰撞的颗粒对的径向相对速度的统计值，颗粒间径向相对速度越大，越容易发生碰撞。可能发生碰撞的颗粒对（colliding pair）的径向相对速度 w_r 的统计计算，以及颗粒对的径向分布函数 $g(R)$ 的计算，与颗粒碰撞的模拟过程是相互独立的。如果颗粒对的相对距离在 $(R-\delta/2, R+\delta/2)$ 范围内，则认为这两个颗粒可能发生碰撞，记录颗粒的速度和位置信息。以 $N_p^{colliding}$ 表示统计时间内在圆环内搜索到的所有可能发生碰撞的颗粒对的对数，则径向相对速度 w_r 的 DNS 统计值可以表示为

$$\langle |w_r| \rangle = \frac{\sum_{i=1}^{i=N_p^{colliding}} \frac{\boldsymbol{w}_i \cdot \boldsymbol{R}}{R}}{N_p^{colliding}} \tag{2.26}$$

由统计力学理论[46]，$g(r)$ 可定义为当某个颗粒在 $X=0$ 位置时，在与它距离为 r 的单元体积 $(dr)^3$ 内发现的颗粒对数与均匀分布的比值（见图 2.2）。取 r 为颗粒碰撞半径 R，$g(R)$ 衡量了颗粒浓度变化对碰撞的影响。当 $g(R)=1$ 时，对应颗粒的浓度场是均匀分布；$g(R)$ 越大，颗粒的浓度场越不均匀。根据 $g(R)$ 的物理意义，在 DNS 中可表示为

$$g(R) = \frac{\dfrac{N_p^{colliding}}{V_s}}{\dfrac{N_t N_p^{Nor}}{V_{field}}} \tag{2.27}$$

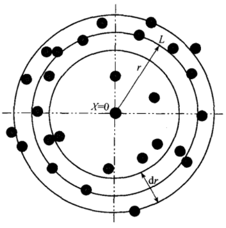


图 2.2 颗粒径向分布函数 $g(r)$ 示意图

式中：V_s 为进行检测的圆环的体积，$V_s=4\pi[(R+\delta/2)^3-(R-\delta/2)^3]$；$N_p^{Nor}$ 为均匀分布时在整个计算域检测的颗粒对数，$N_p^{Nor}=N_p(N_p-1)/2$；V_{field}为计算域的体积，$V_{field}=(2\pi)^3$；N_t 为计算 $g(R)$时的总时间长度。

在不同的 δ/R 取值情况下，径向相对速度和径向分布函数的统计值也会有所不同。鉴于我们关心颗粒对间距为 R 时的统计特性，原则上 δ/R 越小越好，但是太小时又会产生不真实的结果，因此，为保证计算的准确性，计算中选取 $\delta/R=0.02$。

在本节的计算中[42,45]，采用颗粒碰撞搜索的后溯法的计算参数见表 2.2。在计算效率上，以模拟中使用的 64^3 检测网格为例，每步约需要 40s。

表 2.2　计算参数

St_K	Δt	N_{cell}
0	0.04	64^3
0.1～0.9	0.02	64^3
1.0～10.0	0.04	64^3

实际研究中，更加关注颗粒释放到初始均匀各向同性流场后的统计值而不是渐进值。因此，在开始颗粒碰撞的检测之后，只有当颗粒相关的统计平均量如颗粒的湍动能、均方滑移速度及瞬时碰撞率达到稳定状态，才开始统计颗粒平均碰撞率、碰撞核函数、径向分布函数及径向相对速度等参数。模拟结果表明在 $t=6$，约为 $4.747T_e$ 以后，各统计量都趋于稳定，从此时刻开始颗粒的统计计算。统计时间一共持续 6 个涡翻转时间(约需 2.5h)，以提高计算的准确性和可信度。

2）湍流输运效应

湍流输运效应可以理解为：对于不同惯性的颗粒，其穿越湍流涡团的时间不同，导致颗粒间相对速度增大，从而改变颗粒运动轨迹，影响颗粒碰撞。可能发生碰撞的颗粒对的径向相对速度的变化体现了湍流输运效应。湍流中的径向相对速度的大小和分布对颗粒碰撞核的变化有直接影响。

图 2.3 给出了按流场脉动速度的均方根无量纲化的颗粒径向相对速度 $\langle|w_r|\rangle$ 随 St_K 的变化曲线。在 $St_K=0\sim1.0$ 之间，$\langle|w_r|\rangle$基本没有变化，此时颗粒对流体流动的跟随性很好，颗粒间的混合和相对运动不显著，故径向相对速度为较低的值；在 $St_K=1.0\sim6.0$ 之间，$\langle|w_r|\rangle$的增长较快，湍流中大尺度脉动对颗粒掺混的效应开始体现出来，颗粒的相对运动因此越来越显著；$St_K>6.0$ 之后，$\langle|w_r|\rangle$ 增长越来越慢，逐渐趋向稳定。

对于零惯性颗粒，认为颗粒的径向相对速度服从 Gaussian 分布[见式(2.18)]，但是，对于有限惯性颗粒，颗粒的径向相对速度并不一定服从 Gaussian 分布，表 2.3 给出了不同的 St_K 情况下，$\langle|w_r|\rangle/\langle|w_r^2|\rangle^{1/2}$的比值变化。

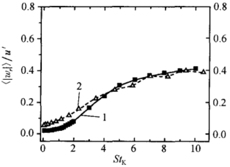


图 2.3 颗粒对的径向相对速度的统计值$\langle|w_r|\rangle$随 St_K 的变化

1. 李瑞霞等[42]DNS 结果($Re_\lambda=51,R/\eta=0.345$);2. Wang 等[21] DNS 结果($Re_\lambda=45,R/\eta=1$)

表 2.3 不同的 St_K 情况下,$\langle|w_r|\rangle/\langle|w_r^2|\rangle^{1/2}$的比值变化

	Gaussian 分布	0.1	1.0	5.0	10.0
$\frac{\langle\|w_r\|\rangle}{\langle\|w_r^2\|\rangle^{1/2}}$	0.798	0.768	0.477	0.560	0.669

同时,图 2.4 给出了不同 St_K 下颗粒的径向相对速度$\langle|w_r|\rangle$的概率密度函数(probablity density function,PDF),并使用颗粒对的径向相对速度平方的统计平均值$\langle w_r^2\rangle$进行无量纲化处理。结合表 2.3 和图 2.4,$St_K\approx0$ 时,$\langle|w_r|\rangle/\langle|w_r^2|\rangle^{1/2}$的值与 Gaussian 分布很接近,其分布近似服从 Gaussian 函数;$St_K\approx1.0$ 时,径向相对速度的 PDF 比 $St_K\approx0$ 时变窄,峰值增加,尾迹变长,$\langle|w_r|\rangle/\langle|w_r^2|\rangle^{1/2}$的比值也与 Gaussian 分布的误差变大,说明此时的 PDF 偏离 Gaussian 分布较明显;$St_K\approx5.0$ 时,径向相对速度的 PDF 的峰值又开始减小;$St_K\approx10.0$ 时,径向相对速度的 PDF 的峰值仍然变小,$\langle|w_r|\rangle/\langle|w_r^2|\rangle^{1/2}$的比值也与 Gaussian 分布的误差变小,又趋向 Gaussian 分布。总之,颗粒的径向相对速度的 PDF 在颗粒惯性变化的过程中,由于湍流中不同尺度运动的影响,并不总是服从 Gaussian 分布,而是具有不同指数的指数分布,对于具有不同强度的湍流流场,对不同惯性的颗粒,该指数是不同的。这说明湍流输运效应不仅通过影响径向相对速度的大小来影响颗粒碰撞,还通过改变颗粒径向相对速度的分布函数来影响碰撞。文献[18]、[20]~[22]对湍流碰撞率的理论分析研究中,都假设颗粒的径向相对速度服从 Gaussian 分布,不能体现湍流场中不同尺度的涡结构对不同惯性的颗粒运动产生的复杂作用,将会对碰撞率的模化产生不真实的结果,与 DNS 结果相比,碰撞核函数约被高估了 4%[3,21]。

3) 局部富集效应

局部富集效应描述了瞬时湍流场中颗粒在某一特定区域内的聚集现象。颗粒

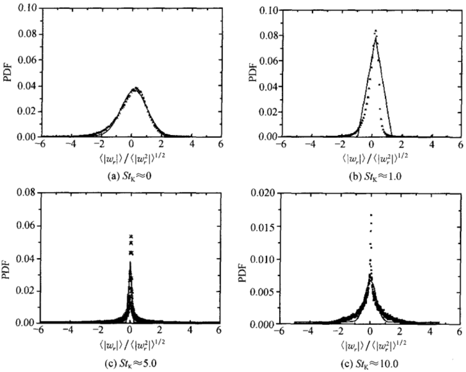


图 2.4　不同的 St_K 下颗粒对径向速度的概率密度函数

的瞬时浓度场是与湍流运动相关的。颗粒的高浓度或者低浓度区域的形成与具体的湍流结构有关，也可能与短时间内的湍涡的作用有关。早期的颗粒碰撞直接模拟中[36,37,47]的一个重要发现就是当颗粒的弛豫时间尺度与 Kolmogorov 时间尺度相当的时候，颗粒的数密度在湍流场中表现的高度的不均匀，流场中的强涡旋像离心力的作用一样，将颗粒从涡旋的核心推向高应力的涡间区域。

我们首先给出局部富集效应的定性描述。图 2.5(a)给出了 $t/T_e=6$ 瞬时涡量 ω 的等值线图(计算区域中平行于水平面 x_1x_2 的一个小区域)及不同大小颗粒的空间分布。可以看到，很小($St_K=0.1$)和很大($St_K=10.0$)的颗粒没有被甩到涡核的外围，而相对均匀地分布在湍流场中。中等大小的颗粒($St_K=1.0$)被甩到涡核的外围而且围绕着特定的轨道运动而不是从一个涡团进入另一个涡团。

图 2.6 给出了颗粒径向分布函数 $g(R)$ 随 St_K 变化的曲线。发现随着 St_K 从 0 增加到 1.0，$g(R)$从 1 迅速增大，$St_K\approx1.0$ 时，$g(R)$达到最大，约为均匀分布的 23 倍左右，这是因为此时小尺度涡结构对颗粒的作用最强，由于湍流涡团对颗粒的离心作用，使得颗粒被甩出高涡量区域，而聚集在高应变率区域，发生强烈的聚集现象，引起颗粒浓度的局部高浓度，导致颗粒碰撞被显著增强。在 $St_K=1\sim5.0$ 时，

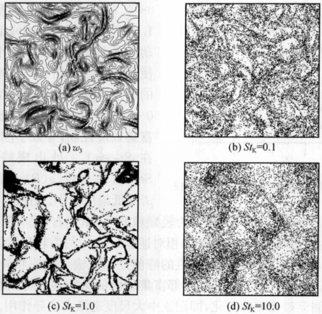


图 2.5 $x_3=\pi$ 处，$t/T_e=6$ 时刻瞬时涡量分量的等值线图及相应的颗粒分布

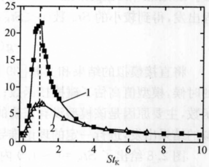


图 2.6 不同惯性颗粒径向分布函数 $g(R)$

1. 李瑞霞等[42]DNS 结果($Re_\lambda=51, R/\eta=0.345$)；

2. Wang 等[21]DNS 结果($Re_\lambda=45, R/\eta=1$)

$g(R)$ 随 St_K 的增加又迅速减小。$St_K>5.0$ 后，$g(R)$ 随 St_K 的增加而逐渐稳定在 1 附近。这是因为较大惯性的颗粒对流体涡团的加速反应越来越慢，以致不能呈现出明显的局部富集现象。当颗粒惯性增大到一定程度，颗粒运动类似于自由分子运动，颗粒在流场内均匀分布。在径向分布函数的变化曲线中同时也给出了 Wang 等[21]的结果，发现两者的变化规律仍然是一致的。但是本算例中径向分布函数的值比文献[21]中的要大得多，主要原因是文献[21]中只计算了 8192 个颗粒，而这里计算了 262 144 个颗粒，颗粒数目越多，聚集效应越显著。

4) 湍流输运效应和局部富集效应

为比较不同效应的影响，图 2.7 给出了可能发生碰撞的颗粒对的径向分布函数 $g(R)$、径向相对速度的统计值 $\langle|w_r|\rangle$，以及考虑局部富集效应和湍流输运效应的颗粒平均碰撞核的估计值 β_t^{est}[式(2.25)]随 St_K 的变化曲线，并都按照零惯性的轻颗粒情况 β_t^0[式(2.20)]进行无量纲化处理。将 $g(R)$ 与 β_t^{est} 比较，可见在 $St_K=$

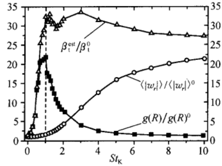


图 2.7　无量纲碰撞参数随 St_K 的变化曲线

0～0.7 之间，两者几乎重叠；在 $St_K \approx 1.0$ 处，两者同时出现峰值；此时颗粒运动由各向同性湍流中的小涡结构控制，使颗粒浓度变的十分不均匀，从而极大的增强了湍流碰撞核函数。说明 St_K＝0～1.0 时，湍流碰撞核函数主要由局部富集效应控制，导致了湍流碰撞核函数在 $St_K \approx 1.0$ 处出现峰值。然而，在 $St_K > 1.0$ 之后，$g(R)$ 迅速降低，而 β_t^{est}/β_t^0 降低幅度很小。在 $St_K \approx 3.0$ 附近，湍流碰撞核函数又出现另一个峰值，仍为轻颗粒的 30 倍左右；此时颗粒的径向分布函数 $g(R)$ 仅为轻颗粒的 4 倍，而径向相对速度 $\langle|w_r|\rangle$ 约为轻颗粒的 8 倍左右，这说明在 $St_K \approx 3.0$ 附近湍流碰撞核函数的峰值是湍流输运效应和局部富集效应联合作用的结果。在 $St_K > 3.0$ 之后，局部富集效应的影响逐渐可以忽略，湍流输运效应逐渐主导湍流碰撞率的变化，即湍流中大尺度逐渐占主导作用。

此处单独考虑 $St_K < 1.0$ 的颗粒，目前针对细微颗粒物的湍流碰撞模型并不多。Zaichik 和 Alipchenkov[39,40] 从颗粒的相对速度的概率密度函数的动力学方程出发，得到较小的 St_K 数（$0 < St_K < 1$）时径向分布函数的一个经验表达式：

$$g(R) \propto R^{-\frac{4}{5}St_K^2} \tag{2.28}$$

将直接模拟的结果和文献[39]中的模型结果进行对比[45]，发现在 $St_K < 0.5$ 的时候，模型值高估了碰撞核函数；而 $St_K < 0.5$ 之后，模型值又大大低估了碰撞核函数，主要原因是该模型没有正确的估计局部富集效应。因此，此处尝试从直接模拟的结果出发，进行一定的理论推导，试图给出一个简单的湍流碰撞核模型。

图 2.8 给出了 St_K＝0～1.0 内，无量纲碰撞参数的变化曲线。可以明显看出，在 St_K＝0～1.0 内，颗粒对的径向相对速度变化极微，与 $St_K \sim 0$ 时的结果十分接近。从涡-颗粒相互作用考虑，此时颗粒主要与湍流中的小涡结构相互作用，颗粒对流体脉动速度的响应速度很快，可以认为此时主要是湍流对颗粒的剪切作用主导颗粒运动。因此，St_K 在 0～1.0 时，径向相对速度 $\langle|w_r|\rangle$ 可以用 Saffman 和 Turner[2] 提出的剪切作用来近似，得到

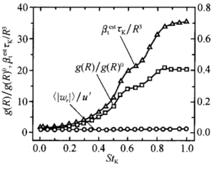


图 2.8　无量纲碰撞参数随 St_K 的变化（St_K＝0～1.0）

$$\langle |w_r| \rangle^{St_K<1} \cong \langle |w_r| \rangle^{St_K\to 0} = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\left(\frac{R^2}{15}\frac{\varepsilon}{\nu}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{2.29}$$

对于径向分布函数，我们首先做渐近性分析探讨局部富集发生的原因。对于小惯性颗粒，颗粒对当地流体运动的响应十分迅速，在不考虑体积力的情况下，颗粒速度可以定义为

$$\boldsymbol{v}(x,t) = \boldsymbol{u}(x,t) - \tau_p\left(\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} + \boldsymbol{u}\cdot\nabla \boldsymbol{u}\right) \tag{2.30}$$

对式(2.30)取散度可得

$$\nabla\cdot \boldsymbol{v} = -\tau_p \frac{\partial \boldsymbol{u}_j}{\partial x_i}\frac{\partial \boldsymbol{u}_i}{\partial x_j} = -\tau_p\left(\boldsymbol{s}_{ij}^2 - \frac{\boldsymbol{\omega}^2}{2}\right) \tag{2.31}$$

式中：$\boldsymbol{\omega} = \nabla\times\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{s}_{ij} = (\partial u_i/\partial x_j + \partial u_j/x_i)/2$ 分别为流体的涡矢量和应变率张量。

从式(2.31)可知，在涡量值大而应变率低的区域颗粒速度场的散度为正，而在涡量值小而应变率高的区域颗粒速度场的散度为负，也就是说，颗粒有聚集于涡量小而应变率高区域的趋势，而且当 $St_K<1.0$ 时，颗粒的弛豫时间越大，富集现象越明显。

局部富集体现了颗粒浓度场的变化，在拉格朗日坐标下，浓度的连续性方程可以写成[20]

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -n(\nabla\cdot \boldsymbol{v}(x,t)) = -n\left[-\tau_p\left(\boldsymbol{s}_{ij}^2 - \frac{\boldsymbol{\omega}^2}{2}\right)\right] \tag{2.32}$$

在沿着拉格朗日轨迹上，对当地浓度进行积分，对所有轨迹取平均，可以得到空间平均的浓度二阶矩的表达式：

$$\langle n_r^2 \rangle = \left\langle n_0^2 \exp\left[\tau_p \int_{-t_r}^{0}\left(\boldsymbol{s}_{ij}^2 - \frac{\boldsymbol{\omega}^2}{2}\right)t'\mathrm{d}t'\right]\right\rangle \tag{2.33}$$

对于小颗粒，在小于 Kolmogorov 尺度 η 的距离范围内，$\left(\boldsymbol{s}_{ij}^2 - \frac{\boldsymbol{\omega}^2}{2}\right)$的大小可以与距离联系起来[48,49]，

$$\boldsymbol{s}_{ij}^2 - \frac{\boldsymbol{\omega}^2}{2} \propto \ln\left(\frac{\eta}{r}\right) \tag{2.34}$$

这样，在拉格朗日轨迹上，在距离 r 小于 η 时，当地颗粒浓度满足：

$$\langle n_r^2 \rangle \propto \left(\frac{\eta}{r}\right)^{\alpha} \tag{2.35}$$

对于 $St_K<1.0$ 的情况，由于径向分布函数 $g(R)$表示相距为 R 时观察到颗粒对的概率与随机分布的参考概率的比值。而 R 很小，当地观察到颗粒对的概率与当地浓度 n_r^2 成比例，因此，可以假设：

$$g(R) \approx \frac{\langle n_r^2 \rangle}{n_0^2} \tag{2.36}$$

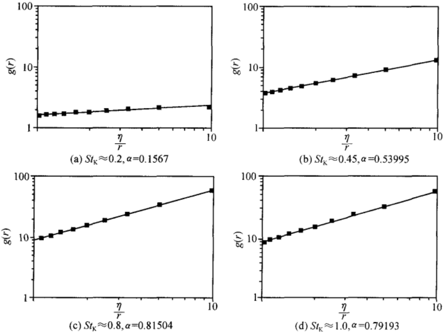
这样就可以得到

$$g(R) \propto \left(\frac{\eta}{r}\right)^{\alpha} \tag{2.37}$$

因此，我们试图找出指数 α 随 St_K 的变化规律，以对径向分布函数作出合理的模型。可以看出，指数 α 反映了不同的距离情况下，颗粒富集程度的变化。指数 α 可以通过式(2.38)计算[50]：

$$\alpha = \frac{\lg(g(r))}{\lg \dfrac{\eta}{r}} \tag{2.38}$$

式中 $g(r)$的计算过程与 $g(R)$相同，只是计算过程中要改变间距 r。对于每个 St_K 的颗粒，计算不同 r 情况下 $g(r)$的变化，拟合后得到的斜率即为指数 α。图 2.9 给出了几种不同 St_K 时的拟合结果。



(a) $St_K\approx0.2, \alpha=0.1567$　(b) $St_K\approx0.45, \alpha=0.53995$

(c) $St_K\approx0.8, \alpha=0.81504$　(d) $St_K\approx1.0, \alpha=0.79193$

图 2.9　不同 St_K 时指数 α 的拟合曲线

从图 2.9 可以发现，$g(r)$随 r 的增加而线性减小。图 2.10 给出 St_K 在 0～1.0 时的指数 α 的变化曲线。发现 St_K 在 0～0.6 之间变化时，指数 α 基本上随着 St_K

的增加而线性增加，在 $St_K \approx 0.6$ 处出现一小峰；随着 St_K 继续增加，指数 α 呈现先减小又增加的微弱变化，在 $St_K \approx 0.8$ 处出现另一小峰。直接模拟的结果并没有给出良好的线性变化关系，而从前面的渐近分析看，指数 α 应该是随 St_K 线性变化的。造成这种情况的原因，一方面可能在于数值模拟的误差，在图 2.9 中，原则上对每个点的计算都应该与 $g(R)$ 的计算过程类似，应计算长时间的平均结果，这样大约需要 4h 才能完成一个点的计算，而这里为了节约时间，只对最后一个时间步达到稳定的颗粒场信息进行了统计；另一方面，渐近性分析是针对颗粒直径 d_p 小于 Kolmogorov 尺度 η 的距离范围内，颗粒的 St_K 越小其结果越真实。考虑这两个因素，这里仍然采用线性关系拟合得到指数 α 和 St_K 的关系，拟合得到的关系式为

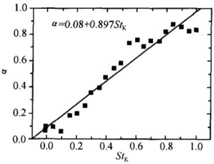


图 2.10 给出 St_K 在 0～1.0 时的指数 α 的变化曲线

$$\alpha = 0.08 + 0.897 St_K \tag{2.39}$$

因此，对于有限惯性小颗粒计算工况，St_K 在 0～1.0 之间时，径向分布函数可以近似为

$$g(R)^{St_K<1} = c_0\left(\frac{\eta}{R}\right)^{\alpha} = c_0\left(\frac{\eta}{R}\right)^{0.08+0.897St_K} \tag{2.40}$$

结合式(2.29)和式(2.40)，可以得到 St_K 在 0～1.0 之间，$Re_\lambda \approx 50$ 时，有限惯性小颗粒的湍流碰撞核函数的模型。

$$\begin{aligned}\beta_t(St_K < 1) &= 2\pi R^2\langle|w_r|\rangle g(R) = 2\pi R^2\sqrt{\frac{2}{\pi}}\sqrt{\frac{R^2}{15}\frac{\varepsilon}{\nu}}c_0\left(\frac{\eta}{R}\right)^{0.08+0.897St_K} \\ &= c_0R^3\sqrt{\frac{8\pi}{15}\frac{\varepsilon}{\nu}}\left(\frac{\eta}{R}\right)^{0.08+0.897St_K}\end{aligned} \tag{2.41}$$

这个有限惯性小颗粒的碰撞模型，只考虑惯性的影响，没有考虑湍流场的雷诺数、耗散率等参数的变化。实际上，雷诺数的大小对模型的建立有非常重要的影响，当湍流场的雷诺数变大，有限惯性小颗粒的局部富集效应会变得更加显著，尤其是湍流场可能发生间歇现象，使得指数 α 可能大于 1，将会极大地增强颗粒的碰撞。由于计算条件的限制，目前没能实现大雷诺数的计算，在以后的计算中可以考虑使用 LES 方法。

2.1.5 有限惯性颗粒碰撞核的推荐模型

以上半经验模型只能适用于 $St_K < 1.0$ 的有限惯性小颗粒碰撞。本书综合文

献结果，总结了一个考虑湍流输运效应和局部富集效应的有限惯性颗粒碰撞核模型。基于圆球模式，湍流作用下的有限惯性颗粒碰撞核函数表达为

$$\beta_t = 2\pi R^2 \langle |w_r| \rangle g(R) = 2\pi R^2 \left(\frac{2}{\pi} \langle w_r^2 \rangle_t \right)^{1/2} g(R) \tag{2.42}$$

按照 Saffman 和 Turner[2]和 Wang 等[4]的理论，湍流对颗粒径向相对速度的影响可以分成四部分，即剪切项、加速项、耦合项和重力项，即

$$\langle w_r^2 \rangle_t = \langle w_r^2 \rangle_{\text{shear}} + \langle w_r^2 \rangle_{\text{accel}} + \langle w_r^2 \rangle_{\text{coup}} + \langle w_r^2 \rangle_{\text{grav}} \tag{2.43}$$

（1）剪切项反映了颗粒因流体的剪切应力造成的碰撞，仍然采用零惯性颗粒时的剪切项[4]，即

$$\langle w_r^2 \rangle_{\text{shear}} = \frac{R^2}{15} \frac{\bar{\varepsilon}}{\nu} \tag{2.44}$$

（2）加速项代表了惯性不同的颗粒因对流体的加速作用反应不一造成的碰撞，Kruis 和 Kusters[19]推导了圆柱模式下的加速项，而 Wang 等[21]基于圆球模式对单分散颗粒群时的加速项进行了修正。综合两者的研究结果，推荐如下模型：

$$\langle w_r^2 \rangle_{\text{accel}} = C_w (1-b)^2 u_f'^2 \frac{\gamma}{\gamma - 1} \frac{(\theta_i + \theta_j)^2 - 4\theta_i\theta_j \sqrt{\dfrac{1+\theta_i+\theta_j}{(1+\theta_i)(1+\theta_j)}}}{\theta_i + \theta_j} \cdot \left[\frac{1}{(1+\theta_i)(1+\theta_j)} - \frac{1}{(1+\gamma\theta_i)(1+\gamma\theta_j)} \right] \tag{2.45}$$

式中：C_w 为一个匹配常数，Wang 等[21]基于直接数值模拟结果而推荐为 1.68；b 为虚假质量效应系数，$b=3\rho_f/(2\rho_p+\rho_f)$；$u_f'$为流体脉动速度均方值；$\gamma$ 为谱常数；θ 为无量纲化的颗粒弛豫时间。它们的模型如下：

$$\begin{cases} u_f'^2 = \dfrac{\gamma (\bar{\varepsilon}\nu)^{\frac{1}{2}}}{0.183} \\ \gamma = \dfrac{0.183 u_f'^2}{(\bar{\varepsilon}\nu)^{\frac{1}{2}}} \\ \theta = \dfrac{\tau_p}{T_l} \\ T_l = \dfrac{0.4 u_f'^2}{\bar{\varepsilon}} \end{cases} \tag{2.46}$$

式中：T_l 为流体的拉格朗日积分时间尺度。

（3）耦合项用以衡量颗粒惯性与流体加速的空间变化或者与体积力（如重力）之间的耦合作用，采用 Hu 和 Mei 的模型[15]：

$$\langle w_r^2 \rangle_{\text{coup}} = 2\left(1-\frac{\rho_f}{\rho_p}\right)^2 \tau_{pi}\tau_{pj} \left\langle \left(\frac{Du}{Dt}\right)^2 \right\rangle \frac{R^2}{\lambda_D^2} \tag{2.47}$$

(4) 重力项代表重力作用下颗粒不均匀沉降而造成的碰撞，同样采用 Wang 等基于 Saffman 和 Turner 模型[2]的修正模型[4]：

$$\langle w_r^2 \rangle_{\text{grav}} = \frac{\pi}{8}(\tau_{pi}-\tau_{pj})^2 \left(1-\frac{\rho_f}{\rho_p}\right)^2 g^2 \tag{2.48}$$

于是，综合式(2.44)、式(2.45)、式(2.47)和式(2.48)，可以计算得到有限惯性颗粒的径向相对速度。

径向分布函数 $g(R)$ 更为复杂，目前尚只存在半经验公式。Wang 等[21]根据其直接数值模拟的结果，提出径向分布函数 $g(R)$ 的经验公式为

$$\begin{aligned} \frac{g(R)-1}{Re_\lambda} = & \frac{y_0(St_K)[1-z_0^2(St_K)]}{Re_\lambda} + z_0^2(St_K)\{y_1(St_K)[1-z_1(St_K)] \\ & + y_2(St_K)z_1(St_K) + y_3(St_K)z_2(St_K)\} \end{aligned} \tag{2.49}$$

式中：

$$Re_\lambda = \frac{u_f'\lambda}{\nu}$$

$$\begin{cases} y_0(St_K) = 18St_K^2 & St_K < 0.5 \\ y_1(St_K) = 0.36St_K^{2.5}\exp(-St_K^{2.5}) & 0.5 < St_K < 1.25 \\ y_2(St_K) = 0.24\exp(-0.5St_K) & 1.25 < St_K < 5.0 \\ y_3(St_K) = 0.013\exp(-0.07St_K) & St_K > 10.0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} z_0(St_K) = \dfrac{1}{2}\times\left(1+\tanh\dfrac{St_K-0.5}{0.25}\right) \\ z_1(St_K) = \dfrac{1}{2}\times\left(1+\tanh\dfrac{St_K-1.25}{0.1}\right) \\ z_2(St_K) = \dfrac{1}{2}\times\left(1+\tanh\dfrac{St_K-6.5}{2.5}\right) \end{cases}$$

以上模型仅仅关注颗粒惯性和雷诺数的作用，没有考虑颗粒浓度、颗粒大小和质量负载的影响。另外，该模型基于以下假设：颗粒直径远小于 Kolmogorov 尺度，可以不考虑颗粒间流体作用；在低浓度的条件下，不考虑颗粒相对流体的作用；不考虑体积力的作用；流量平衡。而且，$g(R)$ 中以 0.5 作为转折点，对于低雷诺数是合适的，对于高雷诺数就不是最佳的数值。在高雷诺数，聚集效应比湍流输运对碰撞率的增大作用更明显。

2.1.6 布朗运动和湍流运动共同作用下的碰撞核

因为湍流和布朗运动对颗粒碰撞的影响的尺度不同，可以认为两者是相互独立的[51]。因而由湍流运动和布朗运动产生的颗粒径向相对速度可以分别表述：

$$\langle w_r^2 \rangle = \langle w_r^2 \rangle_B + \langle w_r^2 \rangle_t \tag{2.50}$$

于是，在圆球模式下，湍流和布朗运动共同作用下的颗粒碰撞率为

$$\begin{cases} \beta = 2\pi R^2 \langle |\, w_r \,| \rangle g(R) = 2\pi R^2 \left[\dfrac{2}{\pi} (\langle w_r^2 \rangle_t + \langle w_r^2 \rangle_B) \right]^{\frac{1}{2}} \\ g(R) = (\beta_t^2 + \beta_B^2)^{\frac{1}{2}} g(R) \\ \beta_t = 2\pi R^2 \left(\dfrac{2}{\pi} \langle w_r^2 \rangle_t \right)^{\frac{1}{2}} \\ \beta_B = 2\pi R^2 \left(\dfrac{2}{\pi} \langle w_r^2 \rangle_B \right)^{\frac{1}{2}} \end{cases} \tag{2.51}$$

对于布朗运动所引起的颗粒径向相对速度平方的均方值，基于分子噪声假设（即统计无关假设），可以如下模化[51]：

$$\langle w_r^2 \rangle_B = \frac{kT}{m_1} + \frac{kT}{m_2} = \frac{kT}{m_{12}}, \quad m_{12} = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \tag{2.52}$$

式中：m_1、m_2 分别为两颗粒的质量；m_{12} 为两颗粒的有效质量。

然而在复杂工况中，湍流作用和布朗作用各自对颗粒碰撞过程的影响到底有多大、是否相互独立、能否简单的使用调和平均衡量两者的影响，均值得继续探讨。

关于布朗碰撞核、湍流碰撞核的文献综述和模型总结也可以参照文献[43]、[45]。

2.2 凝　　并

发生几何碰撞的颗粒对并不一定粘结在一起，即发生通常所说的凝并事件，当几何碰撞即将发生时，颗粒间的流体润滑效应会减少实际碰撞发生的概率，特别是对于大小不一致的颗粒间的碰撞，此时需要引入一个碰撞效率(collision efficiency)η_p 来考虑。而实际碰撞发生之后是否能粘结在一起还受颗粒的表面黏性控制，范德华力、湿度、静电等也会产生类似地影响，此时需要引入凝并效率(coagulation efficiency)来考虑这种情况。实际的凝并核等于几何碰撞核、碰撞效率和凝并效率三者的乘积。

2.2.1 碰撞效率

碰撞效率定义为实际发生的碰撞次数与理论上将要发生的碰撞次数的比例，

这是由于各种因素所引起的颗粒间轨迹滑移。Ho 和 Sommerfeld[52] 发展了一个大颗粒和小颗粒之间的碰撞效率模型。假设小颗粒都均匀地分布在气流当中，和那些大的颗粒球体相比，它们的大小可以忽略，这时，碰撞的效率可以由小颗粒的边界轨道(boundary particle trajectory)的径向距离和大颗粒的半径的比率的平方得到，如图 2.11 所示，Y_c 即为小颗粒的边界轨道(小颗粒恰好与大颗粒碰撞处)与大颗粒中心轴线的径向距离，d_p 为小颗粒的直径，D_k 为大颗粒(或称为收集体)的直径。注意到，大颗粒周围的气流场与基于颗粒相对速度的雷诺数 Re 相关。当 Re 比较大时，直到接近大颗粒流线才开始偏离原来方向，此时流动模式对应于非黏滞性流体；当 Re 比较小的时候，黏性阻力对流动有非常明显的影响，大颗粒会对上游的流场产生一定程度的干扰作用。因此，围绕大颗粒的气流的流动模式强烈地依赖于 Re。基于这些认识，碰撞效率可以由式(2.53)给出[52]：

$$\eta_p = \left(\frac{2Y_c}{D_k}\right)^2 = \left(\frac{\psi_i}{\psi_i + a}\right)^b \tag{2.53}$$

式中：a 和 b 为与雷诺数相关的参数，可以如下选取：当 $Re<1$ 时，$a=0.65$ 并且 $b=3.7$；ψ_i 为惯性参数或者 Stokes 数[53]，描述小颗粒和大颗粒的相互作用：

$$\psi_i = \frac{\rho_p |u_{p1} - u_{p2}| d_p^2}{18\mu D_k} \tag{2.54}$$

式中：ρ_p 为小颗粒的密度；$|u_{p1} - u_{p2}|$ 为两颗粒的相对速度。

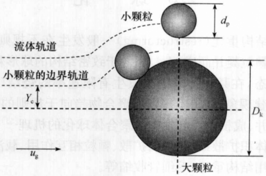


图 2.11 碰撞效率[52]

2.2.2 凝并效率

决定两颗颗粒是否粘结在一起(凝并)的基本标准是临界速度 v_{cr}，它可以从能量平衡方程中得到。当仅仅考虑范德华力的时候，临界速度可由式(2.56)给出[52]：

$$v_{cr} = \frac{1}{d_p} \frac{(1-e^2)^{\frac{1}{2}}}{e^2} \frac{A}{\pi z_0^2 \sqrt{6 p_{pl} \rho_p}} \tag{2.55}$$

式中：e 为能量恢复系数(energetic restitution coefficient)；A 为 Hamaker 常量；z_0 为接触长度；p_{pl}为材料极限接触压力。

当颗粒间法向相对速度小于临界速度 v_{cr}时，认为两碰撞颗粒的凝并过程发生：

$$|\vec{u}_{p1} - \vec{u}_{p2}| \cos\phi \leqslant v_{cr} \tag{2.56}$$

该凝并效率模型并非采用精确的数学方程来表示，而是采用一个判断表达式，故该模型更适合基于拉格朗日坐标体系的数值模拟中采用。模型的详细描述可以参照文献[23]、[52]。

另外，值得注意的是，在某些简单的凝并核的主导下，颗粒尺度分布函数的时间演变过程存在理论分析解，且这些简单的凝并核具有相应的物理意义，因此也在某些场合得以采用[54]，如其常数凝并核 $\beta(u,v)=A$(A 为常数)表示凝并速率与颗粒尺度无关，它可视为布朗凝并的一种极端情形；线性凝并核 $\beta(u,v)=A(u+v)$表示两颗颗粒的凝并概率正比于两颗颗粒的体积总和，通常可用于近似描叙湍流重力机制作用下的颗粒凝并行为；二次方凝并核 $\beta(u,v)=Auv$ 表示两颗颗粒的凝并概率取决于两颗颗粒体积的乘积，是对凝并过程中一种临界现象"凝胶化"的描述。

2.3 球　　化

颗粒的球化或结构重建(restructuring)一般发生在不规则聚合物(一般由多个小尺度球形单体颗粒凝并而成)上。相对于致密结构的球形颗粒，这种结构的聚合物一般处于亚稳态，在某种环境中会发生有限速率的烧结(sintering)[或熔融(fusion)]或结构重建现象，使得不规则的聚合物趋向于规则的球形颗粒。颗粒的球化事件通常与凝并、成核等一起发生。聚合体球化的机理[55]包括表面活化导致的黏性流烧结中的体积扩散或/和表面扩散、颗粒相互作用、载流的剪切作用、干粒状团聚体的布朗作用结构重建、毛细管收缩等。

聚合体的球化事件导致其表面积随时间而变化，Koch 和 Friedlander[56]提出了线性形式的表面积减少速率公式：

$$\dot{a} = \frac{da}{dt} = -\frac{1}{t_f}(a - a_{final}) \tag{2.57}$$

式中：t_f 为一个与机理相关的特征时间尺度；a_{final} 为与原始不规则聚合体的体积 v 一样大的致密球形颗粒的表面积，$a_{final}=\pi(6v/\pi)^{2/3}$。

对于黏性流烧结(viscous flow sintering)机理，特征时间尺度 t_f 为[57]

$$t_{\mathrm{f}} = \frac{\mu r_0}{\sigma} \tag{2.58}$$

式中：μ 为球形单体的动力黏度；r_0 为球形单体的半径；σ 为颗粒表面活化能。

对于体积扩散（bulk diffusion）机理，特征熔融时间尺度为[57]

$$t_{\mathrm{f}} = \frac{k_{\mathrm{B}} T r_0^3}{12 D_{\mathrm{v}} v_{\mathrm{m}} \sigma} \tag{2.59}$$

式中：D_{v} 为体积扩散系数（$\mathrm{m^2/s}$）；v_{m} 为冷凝相中的有效气体分子体积；δ 为表面扩散层厚度，近似等于 $3(6v_{\mathrm{m}}/\pi)^{1/3}$。

对于表面扩散（surface diffusion）机理，特征熔融时间尺度为[58]

$$t_{\mathrm{f}} = \frac{k_{\mathrm{B}} T r_0^4}{24 D_{\mathrm{s}} v_{\mathrm{m}} \sigma \delta} \tag{2.60}$$

式中：D_{s} 为表面扩散系数（$\mathrm{m^2/s}$）。

由于聚合体球化事件而对颗粒表面积的影响可以通过如下平衡方程描述：

$$\frac{\partial n(v,a,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial a}[\dot{a} n(v,a,t)] \tag{2.61}$$

2.4　冷凝/蒸发

Friedlander[57]总结了各种区域内、各种机理控制的冷凝/蒸发核的数学模型如下：

自由分子区（$Kn \gg 1$），扩散机理：

$$I_{\mathrm{t}}^{\mathrm{fm}}(v) = \frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t} = \frac{\alpha \pi d_{\mathrm{p}}^2 v_{i0}}{\sqrt{2\pi m_{i0} K_{\mathrm{B}} T}} (p_i^{\infty} - p_i^{\mathrm{eq}}) = \frac{\alpha \pi d_{\mathrm{p}}^2 M_i}{\rho_i \sqrt{2\pi M_i R T}} (p_i^{\infty} - p_i^{\mathrm{eq}}) \tag{2.62}$$

连续区（$Kn \ll 1$），分子轰击机理：

$$I_{\mathrm{t}}^{\mathrm{co}}(v) = \frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t} = \frac{2\pi d_{\mathrm{p}} D_i v_{i0}}{K_{\mathrm{B}} T} (p_i^{\infty} - p_i^{\mathrm{eq}}) = \frac{2\pi d_{\mathrm{p}} M_i D_i}{\rho_i R T} (p_i^{\infty} - p_i^{\mathrm{eq}}) \tag{2.63}$$

过渡区：

$$I_{\mathrm{t}}^{\mathrm{tran}}(v) = I_{\mathrm{t}}^{\mathrm{co}}(v) \frac{1 + Kn}{1 + 1.71 Kn + 1.333 Kn^2} \tag{2.64}$$

表面反应机理：

$$I_{\mathrm{sr}}(v) = \frac{\alpha \pi d_{\mathrm{p}}^2 v_{i0}}{\sqrt{2\pi m_{i0} K_{\mathrm{B}} T}} p_i^{\mathrm{s}} = \frac{\alpha \pi d_{\mathrm{p}}^2 M_i}{\rho_i \sqrt{2\pi M_i R T}} p_i^{\mathrm{s}} \tag{2.65}$$

体积反应(液滴相反应)机理:

$$I_{vr}(v) = \frac{\pi d_p^3}{6\rho_p}\left(\sum M_i \nu_i\right) r \tag{2.66}$$

式中:p_i^{∞}、p_i^{eq} 和 p_i^{s} 分别为远离颗粒的组分 i 的蒸气压力、靠近颗粒的组分 i 的平衡蒸气压力(饱和蒸气压力)和颗粒表面组分 i 的分压;ρ_i、M_i 和 D_i 分别为组分 i 的密度(kg/m)、分子量(kg/mol)、伪二元扩散系数(m^2/s);m_{i0} 和 v_{i0} 分别为组分 i 的气体分子的质量和体积;ν_i 为组分 i 在体积反应中的化学计量系数;r 为体积反应速率;R 为摩尔气体常数[=8.314J/(mol·K)];T 为绝对温度;α 为调整常数,用于考虑一颗气体分子与颗粒碰撞而被粘结的概率,通常设定为 1。

某些简单的冷凝核[59]具有相应的物理意义,常冷凝核 $I(v)=A$ 描述了一种极限工况,表示颗粒的冷凝/蒸发核与颗粒尺度信息无关;线性冷凝核 $I(v)=Av$ 可描述颗粒表面附近发生化学反应时的冷凝/蒸发工况。

2.5 成　　核

Friedlander[57]总结了成核机理,包括:产生过饱和的物理过程(绝热膨胀、混合、传导冷却和辐射冷却等)和气相化学反应(分为自身成核和多元成核)等。均相成核(或自身成核)的发生是由于过饱和体系中分子团吸附气体分子而使得自身尺度超过临界成核尺度。Friedlander[57]推导了均相成核的速率 $J(m^{-3}\cdot s^{-1})$:

$$J = \frac{2p_i}{\sqrt{2\pi m_{i0} k_B T}} n_i v_{i0}^{\frac{2}{3}} \left[\frac{\sigma v_{i0}^{\frac{2}{3}}}{k_B T}\right]^{\frac{1}{2}} \exp\left[\frac{16\pi\sigma^3 v_{i0}^2}{3(k_B T)^3(\ln S_i)^2}\right] \tag{2.67}$$

式中:p_i 为组分 i 的蒸气分压;n_i 为组分 i 的前驱体浓度(即组分 i 的气体分子浓度);σ 为表面张力;S_i 为过饱和度,$S_i = p_i/p_i^{eq}$。

在很多场合,认为成核是由于化学反应所引起,此时一般认为核体(nucli)的产生速率 $J(t)$ 与前驱体(precursor)的数目浓度 $C_{pre}(t)$ 成一阶正比[60],也就是说

$$J(t) = K_{nucl} C_{pre}(t) = -\frac{dC_{pre}(t)}{dt}$$

式中:K_{nucl} 为成核速率;$C_{pre}(t)$ 为前驱体的数目浓度。

可以推导得到

$$C_{pre}(t) = C_{pre}(0)\exp(-K_{nucl}t)$$

故

$$J(t) = K_{nucl} C_{pre}(0)\exp(-K_{nucl}t)$$

Singh 等[61]同样针对层流预混火焰中的 soot 颗粒总结了自由分子区、连续区、滑流区和过渡区的成核核模型。

2.6 沉　积

各种沉积过程存在各种复杂的动力学机理，如重力作用、布朗扩散、湍流扩散和输运、电荷吸附、热泳迁移、液滴捕集等[62~66]。沉积事件导致颗粒数目不断减少，也必将导致颗粒尺度分布函数不断演变。沉积核 $R(v)$ 也可称为沉积系数，描述单位时间内体积为 v 的颗粒可能沉积的概率（单位为 s^{-1}），各种沉积机理可以在沉积核的模型中集中考虑。

常数沉积核可以描述密封容器内颗粒的泄漏过程。自然界中比较重要的两种沉积机理为重力作用和布朗扩散。Park 等[66]认为同时考虑重力作用和布朗扩散的沉积核可如下描述：

$$E(v) = E_B(v) + E_g(v) = Av^{\frac{-2(n-1)}{3n}} + Bv^{\frac{2}{3}} \tag{2.68}$$

式中：$E_B(v)$、$E_g(v)$ 分别为布朗扩散机制和重力作用机制所控制的沉积核：

$$\begin{cases} E_B(v) = Av^{\frac{-2(n-1)}{3n}} \\ E_g(v) = Bv^{\frac{2}{3}} \\ A = \left(\dfrac{1.7\lambda k_B T}{6\pi\mu}\right)^{\frac{n-1}{n}} \dfrac{nS\sin\left(\dfrac{\pi}{n}\right)\sqrt[n]{k_e L_2^{2-n}}}{\pi V} \\ B = \dfrac{2\rho g}{9\mu H} \\ L_2 = \dfrac{L}{\sqrt{Re}} \end{cases} \tag{2.69}$$

式中：n 为由实验确定的一个适配系数，一般 $n=2.5\sim2.8$；λ 为介质分子的平均自由程；k_B 为 Boltzmann 常数，$k_B=1.38054\times10^{-23}\text{J}\cdot\text{K}$；$T$ 为介质的绝对温度；μ 为介质动力学黏性系数；ρ 为颗粒材料密度；g 为重力加速度；H 为计算区域高度；V 为计算区域体积；S 为计算区域壁面面积总和；k_e 为湍流的扩散系数；L_2 为湍流边界层厚度；L 为流场的特征尺度；Re 为流体介质的雷诺数。

Park 等[66]经过分析认为，对于粗大颗粒的沉积机制主要由重力作用所控制，扩散作用对其影响甚微，此时可认为沉积核 $E(v,t)\approx E_g(v,t)$；而细微颗粒的沉积主要受湍流和布朗扩散的影响，此时可认为沉积核 $E(v,t)\approx E_B(v,t)$；中等尺度颗粒的沉积机制则必须同时考虑重力作用和颗粒扩散，$E(v,t)=E_B(v,t)+E_g(v,t)$。所谓的粗大颗粒、细微颗粒、中等尺度颗粒为一相对概念，对于不同的计算工况，需要具体分析；一般来说[67]，如果 $E_B(v,t)/E_g(v,t)>100$，则可认为尺度为 v 的颗粒为细微颗粒；如果 $E_B(v,t)/E_g(v,t)<0.01$，则可认为尺度为 v 的颗粒为粗大颗

粒；如果 $0.01 \leqslant E_B(v,t)/E_g(v,t) \leqslant 100$，则可认为尺度为 v 的颗粒为中等尺度范围的颗粒。

2.7 破　　碎

颗粒破碎现象更为复杂，液滴、不规则形状的聚合体等在不同环境下的破碎现象各不相同。Podvysotsky 和 Shraiber[68]通过拟合实验数据得到了两个液滴相互作用时的破碎和聚合(coalescence)的数学模型，并认为液滴破碎产生的碎片的尺度满足对数正态分布；刘向军等[69]把该模型引入到循环流化床中描述颗粒团的团聚和破碎。Tsouris 和 Tavlarides[70]综述了液滴破碎和聚合模型方面的研究，并进一步提出了液滴破碎速率模型和聚合速率模型，其中液滴破碎速率认为等于液滴-气流涡团相互作用的碰撞频率乘以液滴破碎效率，液滴聚合速率等于两液滴的碰撞频率乘以聚合效率。Tsouris 和 Tavlarides[70]模型虽然形式复杂，但是物理意义清晰，值得借鉴。

对于煤燃烧过程中煤颗粒、矿物质颗粒、飞灰颗粒等的破碎过程，则异常复杂，目前尚难得到这些颗粒破碎速率和子颗粒尺度分布函数的数学定量描述。Yan 等[71]建立了一个简单的外在矿物质的物理破碎-化学反应两步拟方法。首先在不考虑化学反应的情况下考虑外在矿物质的物理破碎过程，认为一颗原始的外在矿物质颗粒破碎产生 $b+1$ 个碎片的概率 P_b 满足泊松分布(Poisson distribution)：$P_b = e^{-\lambda}\lambda^b/b!$，$b$ 是从 0 开始的整数，表示子颗粒数目，泊松参数 λ 为父颗粒经历破碎事件之后颗粒数目的净增量(即每颗父颗粒产生的子颗粒数目减 1)。假设原始外在矿物质颗粒数目为 N，则可能破碎且产生 $b+1$ 颗子颗粒的原始矿物质颗粒数目为：$N_b = NP_b = Ne^{-\lambda}\lambda^b/b!$，且认为子颗粒尺度和成分都满足均匀分布。在第二步中，考虑子颗粒的化学反应，此时这些子颗粒的质量和成分均将发生改变，Yan 等[71]引入一个“尺度变化因子(size-change factor)”C_d 来考虑化学反应对颗粒尺度分布的影响：$C_d = (C_m \rho_{min}/\rho_{ox})^{1/3}$，其中 C_m 为考虑化学反应的质量改变因子，对于不同成分的矿物质有不同的数值，如对于方解石和黄体矿，C_m 分别为 0.56 和 0.67；ρ_{min} 和 ρ_{ox} 分别为矿物质和反应之后氧化产物的密度。化学反应之后颗粒的尺度等于反应之前颗粒尺度与 C_d 的乘积。

2.8　其他动力学事件

另外一些动力学事件，如表面化学反应(氧化、还原反应等)的核模型则更为复杂，涉及相关的化学组分及反应条件。Singh 等[61]总结了层流预混火焰中的 soot 颗粒与气相组分 O_2、OH^-、H^+、C_2H_2 等的反应速率模型，读者如有需要可以参阅

相关文献。对这种包含化学反应的离散系统动力学演变过程进行颗粒群平衡模拟一般需要与气相化学反应机理结合起来[72]。

2.9 小 结

由于离散系统本身的非线性、非平衡、非稳态、非均匀、多尺度等复杂特性，特别是离散相与连续相的湍流、离散相与离散相之间复杂的相互耦合和相互作用，导致描述离散系统动力学事件发生机理的核模型非常复杂，尽管人们已经付出了巨大的努力来试图单独刻画某种机理对某个动力学事件的影响，但是目前几乎没有研究几种不同的机理对同一个动力学事件的影响，更不用提几种不同的动力学事件之间的相互影响。对核模型进行研究必须依赖于精确的实验研究、高精度的数值模拟(如直接数值模拟等)，以及严密的理论推导，这将是困扰颗粒群平衡模拟、阻挠人们对复杂离散系统动力学演变过程进行细致分析和调控的主要难点。核模型并非一个孤立的研究领域，湍流方面的研究进展可以推动核模型的研究，而所建立的核模型也需要在实际系统中进行检验，此时需要对这种实际离散系统通过颗粒群平衡方程的数值求解来进行颗粒群平衡模拟，以及对这些离散系统进行相关的实验研究。但是客观地讲，目前已经建立的动力学事件核模型大都包括了这些动力学事件的主要内在调控机制，如对于碰撞和凝并而言，布朗扩散和湍流作用是主要的调控机制，这些模型已经能够较为准确地描述这些事件，从而能够服务于工程领域和自然领域。

目前对于核模型的研究主要集中在颗粒碰撞和凝并事件，而过渡区布朗凝并核和有限惯性颗粒的湍流凝并核是研究的重点，我们也针对有限惯性颗粒凝并核的两个主要影响因素(湍流输运效应和局部富集效应)、通过对均匀各向同性湍流中有限惯性小颗粒碰撞行为进行直接数值模拟，提出了针对圆球模式下有限惯性小颗粒碰撞核函数的简单半经验模型。

参 考 文 献

[1] Hu K C, Mei R. Particle collision rate in fluid flows. Physics of Fluids, 1998, 10(4): 1028—1030.

[2] Saffman P G, Turner J S. On the collision of drops in turbulent clouds. Journal of Fluid Mechanics, 1956, 1: 16—30.

[3] Wang L P, Wexler A S, Zhou Y. On the collision rate of small particles in isotropic turbulence. I. Zero-inertia case. Physics of Fluids, 1998, 10(1): 266—276.

[4] Wang L P, Wexler A S, Zhou Y. Statistical mechanical descriptions of turbulent coagulation. Physics of Fluids, 1998, 10 (10): 2647—2651.

[5] Allen M D, Raabe O G. Slip correction measurements of spherical solid aerosol particles in

an improved Millikan apparatus. Aerosol Science and Technology, 1985, 4(3): 269—286.

[6] Slinn W G N. Precipitation scavenging // Raderson D. Atmospheric Sciences and Power Production. Washington DC: Division of Biomedical Environmental Research, US Department of Energy, 1983.

[7] Lee K W, Liu B Y. Theoretical study of filtration by fibrous filters. Aerosol Science and Technology, 1982, 1(2): 147—161.

[8] Allen M R, Tildesley D J. Computer Simulation of Liquids. Oxford: Oxford University Press, 1987.

[9] Fuchs N A. The Mechanics of Aerosols. New York: Pergamon Press, 1964.

[10] Wright P G. On the discontinuity involved in diffusion across an interface (the delta of Fuchs). Discussions of the Faraday Society, 1960, 30: 100—112.

[11] Park S H, Lee K W, Otto E, et al. The log-normal size distribution theory of brownian aerosol coagulation for the entire particle size range. Part I: Analytical solution using the harmonic mean coagulation kernel. Journal of Aerosol Science, 1999, 30(1): 3—16.

[12] Otto E, Fissan H, Park S H, et al. The log-normal size distribution theory of brownian aerosol coagulation for the entire particle size range. Part II: Analytical solution using Dahneke's coagulation kernel. Journal of Aerosol Science, 1999, 30(1): 17—34.

[13] Alipchenkov V M, Zaichik L I. Particle collision rate in turbulent flow. Fluid Dynamics, 2001, 36(4): 608—618.

[14] Abrahamson J. Collision rates of small particles in a vigorously turbulent fluid. Chemical Engineering Science, 1975, 30(11): 1371—1379.

[15] Hu C, Mei R. Effect of inertia on the particle collision coefficient in Gaussian turbulence // The 1997 ASME Fluids Engineering Division Summer Meeting. Vancouver, 1997: FEDSM97-3608.

[16] Smoluchowski M V. Versuch einer mathematischen theorie der koagulationskinetik kolloider lösungen. Zeitschrift für Physikalische Chemie, 1917, 92: 129—134.

[17] William J J E, Crane R I. Particle collision rate in turbulent flow. International Journal of Multiphase Flow, 1983, 9(4): 421—435.

[18] Yuu S. Collision rate of small particles in a homogeneous and isotropic turbulence. AIChE Journal, 1984, 30(5): 802—807.

[19] Kruis F E, Kusters K A. The collision rate of particles in turbulent flow. Chemical Engineering Communications, 1997, 158: 201—230.

[20] Zhou Y, Wexler A S, Wang L P. On the collision rate of small particles in isotropic turbulence. II. Finite inertia case. Physics of Fluids, 1998, 10(5): 1206—1216.

[21] Wang L P, Wexler A S, Zhou Y. Statistical mechanical description and modelling of turbulent collision of inertial particles. Journal of Fluid Mechanics, 2000, 415: 117—153.

[22] Sommerfeld M. The importance of inter-particle collisions in horizontal gas-solid channel flows // Stock, et al. Gas-Particle Flows, 1995, 228: 335—345.

[23] Sommerfeld M. Validation of a stochastic Lagrangian modelling approach for inter-particle collisions in homogeneous isotropic turbulence. International Journal of Multiphase Flow,2001,27(10): 1829—1858.

[24] Sommerfeld M. Analysis of collision effects for turbulent gas-particle flow in a horizontal channel. Part I: Particle transport. International Journal of Multiphase Flow, 2003, 29 (4): 675—699.

[25] Sommerfeld M, Kussin J. Analysis of collision effects for turbulent gas-particle flow in a horizontal channel. Part II: Integral properties and validation. International Journal of Multiphase Flow,2003,29(4): 701—718.

[26] Berlemont A, Achim P, Chang Z. Lagrangian approaches for particle collisions: The colliding particle velocity correlation in the multiple particles tracking method and in the stochastic approach. Physics of Fluids,2001,13(10): 2946—2956.

[27] Berlemont A, Achim P. On the fluid/particle and particle/particle correlated motion for colliding particles in Lagrangian approach//The 3rd ASME/JSME Joint Fluids Engineering Conference: 1999, FEDSM99-7859.

[28] Simonin O. Continuum modelling of dispersed turbulent two-phase flows. Von Karmen Institute Lectures: Combustion in Two-Phase Flows,1996.

[29] Fede P, Simonin O, Villedieu P. Monte Carlo simulation of colliding particles in gas-solid turbulent flows from a joint fluid-particle PDF equation//Proceedings of the Fifth International Symposium on Numerical Methods for Multiphase Flows, ASME Fluids Engineering Summer Meeting, Quebec, 2002: FEDSM2002-31226.

[30] Sundaram S, Collins L R. Collision statistics in an isotropic particle-laden turbulent suspension. Part I. Direct numerical simulations. Journal of Fluid Mechanics, 1997, 335: 75—109.

[31] Reade W C, Collins L R. Effect of preferential concentration on turbulent collision rates. Physics of Fluids,2000,12(10): 2530—2540.

[32] Chen M, Kontomaris K, McLaughlin J B. Direct numerical simulation of droplet collisions in a turbulent channel flow. Part II: Collision rates. International Journal of Multiphase Flow,1998,24(7): 1105—1138.

[33] Mei R, Hu K C. On the collision rate of small particles in turbulent flows. Journal of Fluid Mechanics,1999,391: 67—89.

[34] Franklin C N, Vaillancourt P A, Yau M K, et al. Collision rates of cloud droplets in turbulent flow. Journal of the Atmospheric Sciences,2005,62 (7): 2451—2466.

[35] Chun J, Koch D L, Rani S L, et al. Clustering of aerosol particles in isotropic turbulence. Journal of Fluid Mechanics,2005,536: 219—251.

[36] Wang L P, Maxey M R. Settling velocity and concentration distribution of heavy particles in homogeneous isotropic turbulence. Journal of Fluid Mechanics,1993,256: 27—68.

[37] Squires K D, Eaton J K. Preferential concentration of particle by tubulentce. Physics of

Fluids A, 1991, 3(5): 1169—1179.

[38] Fessler J R, Kulick J D, Eaton J K. Preferential concentration of heavy particles in a turbulent channel flow. Physics of Fluids, 1994, 6(11): 3742—3749.

[39] Zaichik L I, Simonin O, Alipchenkov V M. Two statistical models for predicting collision rates of inertial particles in homogeneous isotropic turbulence. Physics of Fluids, 2003, 15(10): 2995—3005.

[40] Zaichik L I, Simonin O, Alipchenkov V M. Comparison of two statistical models for the calculation of collisions of particles in isotropic turbulence. High Temperature, 2003, 41(5): 646—656.

[41] Zaichik L I, Alipchenkov V M. Pair dispersion and preferential concentration of particles in isotropic turbulence. Physics of Fluids, 2003, 15(6): 1776—1787.

[42] 李瑞霞，柳朝晖，贺铸，等. 各向同性湍流内有限惯性颗粒碰撞的直接数值模拟研究. 力学学报，2006，38(1)：25—32.

[43] 陈胤密. 均匀湍流内有限惯性颗粒碰撞率的直接模拟[硕士学位论文]. 武汉：华中科技大学，2004.

[44] 陈胤密，柳朝晖，郑楚光. 颗粒碰撞的直接模拟算法. 计算物理，2004，21(5)：421—426.

[45] 李瑞霞. 均匀湍流内湍流-布朗颗粒碰撞的直接模拟研究[硕士学位论文]. 武汉：华中科技大学，2006.

[46] Mcquarrie D A. Statistical Mechanics. New York: Harper & Row Publishers, 1976.

[47] Maxey M R. The gravitational settling of aerosol particles in homogeneous turbulence and random flow fields. Journal of Fluid Mechanics, 1987, 174: 441—465.

[48] Falkovich G, Fouxon A, Stepanov M. Acceleraion of rain initiation by cloud turbulence. Nature, 2002, 419(6903): 151—154.

[49] Balkovsky E, Falkovich G, Fouxon A. Intermittent distribution of inertial particles in turbulent flows. Physical Review Letters, 2001, 86(13): 2790—2793.

[50] Hogan R C, Cuzzi J N. Stokes and Reynolds number dependence of preferential particle concentration in simulated three-dimensional turbulence. Physics of Fluids, 2001, 13(10): 2938—2945.

[51] Zaichik L I, Solov'ev A L. Collision and coagulation nuclei under conditions of Brownian and turbulent motion of aerosol particles. High Temperature, 2002, 40(3): 460—465.

[52] Ho C A, Sommerfeld M. Modelling of micro-particle agglomeration in turbulent flows. Chemical Engineering Science, 2002, 57(15): 3073—3084.

[53] Schuch G, Loffler F. Uber die Abscheidewahrscheinlichkeit von Feststoffpartikeln an Tropfen in einer GasstrLomung durch TrLagheitseffekte. Verfahrenstechnik, 1978, 12: 302—306.

[54] Kruis F E, Maisels A, Fissan H. Direct simulation Monte Carlo method for particle coagulation and aggregation. AIChE Journal, 2000, 46(9): 1735—1742.

[55] Tandon P, Rosner D E. Monte Carlo simulation of particle aggregation and simultaneous

restructuring. Journal of Colloid and Interface Science, 1999, 213(2): 273—286.

[56] Koch W, Friedlander S K. The effect of particle coalescence on the surface area of a coagulating aerosol. Journal of Colloid and Interface Science, 1990, 140(2): 419—427.

[57] Friedlander S K. Smoke, dust and haze: Fundamentals of aerosol behavior. New York: Wiley, 1997.

[58] Mullins M W. Mass transport at interfaces in single component systems. Metallurgical and Materials Transactions A, 1995, 26(88): 1917—1929.

[59] Debry E, Sportisse B, Jourdain B. A stochastic approach for the numerical simulation of the general dynamics equation for aerosols. Journal of Computational Physics, 2003, 184(2): 649—669.

[60] Landgrebe J D, Pratsinis S E. Gas-phase manufacture of particulate: Interplay of chemical reaction and aerosol coagulation in the free-molecular regime. Industrial & Engineering Chemistry Research, 1989, 28(10): 1474—1481.

[61] Singh J, Patterson R, Balthasar M, et al. Modelling soot particle size distribution: Dynamics of pressure regimes. Technical Report 25, c4e Preprint-Series, Cambridge 2004.

[62] Corner J, Pendlebury E D. The coagulation and deposition of a stirred aerosol//Proceedings of the Physics Society B, 1951, 64(8): 645—654.

[63] Crump J G, Seinfeld J H. Turbulent deposition and gravitational sedimentation of an aerosol in a vessel of arbitrary shape. Journal of Aerosol Science, 1981, 12(5): 405—415.

[64] Benes M, Holub R F. Aerosol wall deposition in enclosures investigated by means of a stagnant layer. Environment International, 1996, 22(Suppl.): S883—S889.

[65] Park S H, Lee K W. Lognormal size distribution theory for deposition of polydisperse aerosol particles. Nuclear Science Engineering, 2000, 135(3): 288—295.

[66] Park S H, Lee K W. Analytical solution to change in size distribution of polydisperse particles in closed chamber due to diffusion and sedimentation. Atmospheric Environment, 2002, 36(35): 5459—5467.

[67] 赵海波，郑楚光. 描述颗粒沉积动力学演变过程的一种随机算法. 空气动力学学报，2006, 24(2): 141—146.

[68] Podvysotsky A M, Shraiber A A. Coalescence and breakup of drops in two-phase flows. International Journal of Multiphase Flow, 1984, 10(2): 195—209.

[69] 刘向军，徐旭常. 循环流化床内颗粒团运动的数值模拟. 工程热物理学报，2002, 23(5): 649—652.

[70] Tsouris C, Tavlarides L L. Breakage and coalescence models for drops in turbulent dispersions. AIChE Journal, 1994, 40(3): 395—406.

[71] Yan L, Gupta R, Wall T. Fragmentation behavior of pyrite and calcite during high-temperature processing and mathematical simulation. Energy & Fuels, 2001, 15(2): 389—394.

[72] Balthasar M, Mauss F, Knobel A, et al. Detailed modeling of soot formation in a partially stirred plug flow reactor. Combustion and Flame, 2002, 128(4): 395—409.

3 颗粒群平衡模拟的数值方法

如第1章所述，颗粒群平衡方程(PBE)的数值方法是颗粒群平衡模拟(PBM)的重点和难点，也是目前的研究热点之一。虽然目前的研究兴趣已经慢慢转移到多维PBM、多变量PBM和多维多变量PBM以及相应的颗粒群平衡方程上，但是零维单变量PBE是这些研究的基础，本章对此作较为全面的介绍，重点介绍的主流方法是矩方法、分区法和Monte Carlo方法。

3.1 颗粒尺度分布函数动力学演变的特征

可以定义一个颗粒的某个属性的分布函数的通用表达式：

$$q(v,t)=\alpha v^{\gamma}n(v,t) \tag{3.1}$$

这里α和γ为常数。如果已知颗粒尺度分布函数$n(v,t)$，则颗粒其他属性的分布函数也可以随之得到。例如，$\alpha=1$和$\gamma=0$，则$q(v,t)$就是颗粒尺度分布函数；如果$\alpha=\pi^{1/3}6^{2/3}$和$\gamma=2/3$，则$q(v,t)$就是颗粒表面积分布函数；如果$\alpha=1$和$\gamma=1$，则$q(v,t)$就是颗粒体积分布函数；如果$\alpha=1$和$\gamma=2$，则$q(v,t)$就是颗粒体积平方分布函数。

连续形式的颗粒尺度分布函数的m阶矩定义为

$$M_m=\int_{v_{\min}}^{v_{\max}}v^m n(v,t)\mathrm{d}v \tag{3.2}$$

显然M_0为颗粒总数目浓度$N(t)$，M_1为颗粒总体积浓度$V(t)$[对于单组分颗粒而言，颗粒体积的描述等价于颗粒质量的描述，故本书M_1在某些场合也称为颗粒总质量浓度$M(t)$]，M_2为颗粒体积平方。

在充分长时间之后，在某种或者某几种机制作用下，颗粒群尺度谱将达到所谓的“自保持(self-preserving)”分布，即颗粒尺度分布函数的所有特征变量在进行适当的无量纲化后具有稳定的表达式，且并不依赖于初始颗粒尺度分布的函数形式，而只与当地特征变量的参数相关。Swift和Friedlander的实验[1]证明不管初始颗粒尺度分布如何，在足够长时间之后，在布朗凝并机制的作用下，颗粒尺度分布将达到自保持分布。Hidy的数值模拟[2]表明达到自保持状态的时间与初始分布有关，但是不管初始分布如何都将达到自保持分布。

对于初始单分散性颗粒，在常凝并核[$\beta(u,v)=A$，A为常数]的机制作用下，

Friedlander 等[3]经过数学分析认为，在足够长的时间之后，颗粒尺度分布函数将达到自保持分布，并符合如下数学表达式：

$$\lim_{\xi\to 0}\Phi(\eta,\xi)=\mathrm{e}^{-\eta}\Rightarrow\Phi(\eta,\xi)=\mathrm{e}^{-\eta} \tag{3.3}$$

式中：

$$\begin{cases}\Phi(\eta,\xi)=\dfrac{[N(t)]^2}{n(v,t)\varphi(t)}\\ \eta=\dfrac{N(t)v}{\varphi(t)}\\ \xi=\left[\dfrac{N(t)}{N(0)}\right]^2\\ \psi(\eta)=\dfrac{1}{\Phi(\eta,\tau)}\\ \varphi(t)=\displaystyle\int_0^{\infty}vn(v,t)\mathrm{d}v\\ N(t)=\displaystyle\int_0^{\infty}n(v,t)\mathrm{d}v\end{cases} \tag{3.4}$$

式中：$\varphi(t)$表示随时间变化的颗粒总体积，实际上就是颗粒尺度分布函数的一阶矩M_1；$N(t)$为随时间变化的颗粒总数目，实际上就是颗粒尺度分布函数的零阶矩M_0；$\Psi(\eta)$为无量纲的颗粒密度函数；η为无量纲的颗粒体积；ξ为无量纲的时间尺度；$\Phi(\eta,\xi)$为无量纲的颗粒尺度分布函数。

对于初始单分散性颗粒，在连续区布朗凝并核的机理作用下，Friedlander 等[3]经过数学分析认为，在足够长的时间之后，颗粒尺度分布函数也将达到自保持分布，并且在颗粒粒径较小的下端区域，颗粒尺度分布函数存在如下数学关系：

$$\psi(\eta)=\frac{0.5086}{\eta^{1.06}}\exp(1.758\eta^{1/3}-1.275\eta^{-1/3}) \tag{3.5}$$

在颗粒粒径较大的上端区域，满足如下数学关系：

$$\psi(\eta)=0.915\exp(-0.95\eta) \tag{3.6}$$

整体来说，综合上端区和下端区的颗粒尺度分布曲线，发现这条颗粒尺度分布曲线非常类似于对数正态曲线。此时的尺度分布曲线，特别是下端区的分布曲线，非常明显地受凝并核的影响。

另外，Hidy 等[2,4]研究了初始单分散性分布的颗粒在连续区布朗凝并核的机制作用下达到自保持分布的时间长度（time-lag）；Vemury 等[5]探讨了初始对数正态分布的颗粒群在分别考虑连续区布朗凝并和自由分子区布朗凝并时 PSD 达到自保持分布的时间长度。

现在看来，Friedlander 等[3]得到的自保持尺度分布数学表达式是 PBE 研究工

作的一个里程碑，可极好地帮助人们理解颗粒凝并机制下的演变规律，也大量地被应用于检验求解 PBE 的数值方法。

3.2 矩 方 法

3.2.1 传统矩方法

矩方法是描述颗粒尺度分布函数的矩的演变过程的方法。该方法忽略单个颗粒的轨道经历信息和历史信息，而是采用颗粒群的一些平均量和整体量（即各种矩）来描述颗粒群的动力学演变，采用这种方法的出发点是很多领域往往只需要知道这些矩的信息即可。

一般可假设沉积核满足[6] $R(v,t)=A_{\mathrm{depo}}v^a+B_{\mathrm{depo}}v^b$，冷凝/蒸发核满足[7] $I(v,t)=E_{\mathrm{cond}}v^e$，此时，在 PBE 方程(1.1)两边均乘以 v^m，且在最小和最大颗粒体积之间对颗粒体积 v 进行积分，就得到了尺度分布函数的矩方程[8~10]：

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}M_m}{\mathrm{d}t}=&\frac{1}{2}\int_{v_{\min}}^{v_{\max}}\int_{v_{\min}}^{v_{\max}}\beta(v,u)[(u+v)^m-u^m-v^m]n(v,t)n(u,t)\mathrm{d}u\mathrm{d}v\\
&+\left\{\int_{v_{\min}}^{v_{\max}}\int_{v}^{v_{\max}}\gamma(u,v)b(u)S(u)n(u,t)v^m\mathrm{d}u\mathrm{d}v-\int_{v_{\min}}^{v_{\max}}S(v)n(v,t)v^m\mathrm{d}v\right\}\\
&+J(v,t)v^m\delta(v_{\min},v)+mE_{\mathrm{cond}}M_{m+e-1}-(A_{\mathrm{depo}}M_{m+a}+B_{\mathrm{depo}}M_{m+b})
\end{aligned}\tag{3.7}
$$

矩方法一般可得到尺度分布的一些平均信息，如颗粒总数目、平均尺度、多分散程度(PSD 的几何标准偏差)等，从而通过假设的参数化形式的颗粒尺度分布函数而得到颗粒尺度分布的时间演变过程。

为了求解方程(3.7)，传统矩方法(或称为标准矩方法)一般只能针对特定函数形式的颗粒尺度分布进行求解，如假设初始颗粒尺度分布曲线为对数正态分布[11]、gamma 分布[12]等，并认为颗粒尺度分布在其后的演变过程中仍然保持同样的函数形式，即认为已经达到了自保持状态；或者假设初始颗粒尺度分布具有单分散性[13]；或者对凝并核进行一阶 Taylor 扩展[14]等。应用最为广泛的几个特定的颗粒尺度分布函数形式如下：

(1) 对数正态分布的颗粒尺度分布函数

$$
n(v,t)=\frac{1}{3v}\frac{N(t)}{\sqrt{2\pi}\ln\sigma_{\mathrm{g}}(t)}\exp\left\{-\frac{\ln^2\left[\dfrac{v}{v_{\mathrm{g}}(t)}\right]}{18\ln^2\sigma_{\mathrm{g}}(t)}\right\}\tag{3.8}
$$

包含三个主要参数，其中 $N(t)$ 为随时间变化的颗粒总数目浓度(m^{-3})；$\sigma_{\mathrm{g}}(t)$ 为随

时间变化的几何标准方差；$v_g(t)$为随时间变化的颗粒几何平均体积(m^3)。此时

$$M_m = N(t)[v_g(t)]^m \exp\left(\frac{9}{2}m^2\ln^2\sigma_g\right) \tag{3.9}$$

(2) 伽玛(gamma)分布的颗粒尺度分布函数

$$n(v,t) = \frac{N(t)}{\Gamma(\eta+1)}\frac{1}{v_g(t)}\left(\frac{v}{v_g(t)}\right)^\eta \exp\left[-\frac{v}{v_g(t)}\right] \tag{3.10}$$

同样也包含三个参数，其中 η 为表征 gamma 分布的一个实变量。此时

$$M_m = N(t)[v_g(t)]^m \frac{\Gamma(\eta+m+1)}{\Gamma(\eta+1)} \tag{3.11}$$

指数分布是特殊的 gamma 分布($\eta=0$ 或 $\eta=1$)，此时

$$n(v,t) = \frac{N(t)}{v_g(t)}e^{-\frac{v}{v_g(t)}} \tag{3.12}$$

或

$$n(v,t) = \frac{N(t)v}{[v_g(t)]^2}e^{-\frac{v}{v_g(t)}} \tag{3.13}$$

传统矩方法是一种分析方法，它被广泛地应用于得到颗粒尺度分布函数随时间演变过程的理论分析解。例如当仅仅考虑凝并时，利用矩方法，得到颗粒尺度分布函数的矩的控制方程为

$$\frac{dM_m}{dt} = \frac{1}{2}\int_{v_{min}}^{v_{max}}\int_{v_{min}}^{v_{max}}\beta(v,u)[(u+v)^m - u^m - v^m]n(v,t)n(u,t)dudv \tag{3.14}$$

假如考虑连续区布朗凝并工况，$\beta(u,v)=K(u^{1/3}+v^{1/3})(1/u^{1/3}+1/v^{1/3})$，$K$ 为布朗常数，并认为初始颗粒尺度分布函数为对数正态分布，则可以得到如下矩方程组：

$$\begin{cases} \dfrac{dM_0}{dt} = -K(M_0^2+M_{1/3}M_{-1/3}) \\ \dfrac{dM_1}{dt} = 0 \\ \dfrac{dM_2}{dt} = 2K(M_1^2+M_{4/3}M_{2/3}) \end{cases} \tag{3.15}$$

利用对数正态分布的颗粒尺度分布函数矩的特性，可以得到此时三个关键参数的理论分析解如下[11]：

$$N(t) = \frac{N_0}{1+[1+\exp(\ln^2\sigma_0)]KN_0t}$$

$$\ln^2\sigma_g(t) = \frac{1}{9}\ln\left\{2+\frac{\exp(9\ln^2\sigma_{g0})-2}{1+[1+\exp(\ln^2\sigma_{g0})]KN_0t}\right\}$$

$$\frac{v_g(t)}{v_{g0}} = \frac{\{1+[1+\exp(\ln^2\sigma_{g0})]KN_0t\}\times\exp\left(\frac{9}{2}\ln^2\sigma_{g0}\right)}{\left\{2+\frac{\exp(9\ln^2\sigma_{g0})-2}{1+[1+\exp(\ln^2\sigma_{g0})]KN_0t}\right\}^{\frac{1}{2}}} \tag{3.16}$$

由于颗粒尺度分布函数的自保持特性，可以得到此时颗粒尺度分布的时间演变。Lee 和 Park 及其合作者广泛利用这类方法得到了特殊核函数形式时一系列的理论分析解，如分别考虑非规则颗粒和考虑颗粒滑移修正的连续区、自由分子区和过渡区布朗凝并工况的近似解[11,15~21]；考虑布朗扩散和重力沉降机制的沉积核工况的理论解[6]、湿去除机制下的沉积核工况的理论解[22,23]、冷凝/蒸发核工况的理论解[24,25]和电厂静电除尘器中颗粒的沉积机制的工况下的理论分析解[26]等，原理与上类似，限于篇幅不再赘述。

总之，传统矩方法计算量小，但数学模型复杂，极难推导，一般需预先设定初始的颗粒尺度分布函数和便于求解的特殊形式的核函数，且因不能得到颗粒的历史经历效应而丢失颗粒演变的内部细节信息。传统矩方法由于需要假设颗粒尺度分布已经达到自保持状态，所以无法描述达到自保持状态之前的过程，如由于化学反应而生成颗粒的过程等。但是很多工程和自然界工况中颗粒群服从对数正态或者伽玛分布，所以传统矩方法仍然有较广泛的应用范围，而且利用传统矩方法所推导得到的特定尺度分布形式和特定核函数形式下的理论分析解可作为其他数值方法的参照。

3.2.2　积分矩方法

传统矩方法最大的问题在于：必须对所建立的低阶矩方程组进行封闭，这样才能通过四阶龙格-库塔法等对其进行求解以得到颗粒尺度分布函数的低阶矩的时间演变过程。为了进行模型封闭，传统矩方法往往对初始颗粒尺度分布函数和动力学事件的核模型有额外的要求。McGraw(1997)[27]首先发展了一种积分矩方法(the quadrature mothod of moments，QMOM)来克服这种问题。此时，并不对低阶矩方程组进行精确的封闭，而是采用一个满足封闭条件的、基于 n 点高斯积分方法(n-point Gaussion quadrature)来近似颗粒尺度分布函数的各阶矩。基本思路如下：

对于颗粒尺度分布函数的各阶矩，采用 n 点高斯积分来近似：

$$M_m = \int v^m n(v,t)\,\mathrm{d}v \cong \sum_{i=1}^{q} v_i^m w_i \tag{3.17}$$

式中：v_i 称为特征体积(abscissas)，即第 i 点的颗粒尺度；w_i 称为权重(weights)，表示特征尺度为 v_i 的颗粒的数目；q 为积分节点的数目，$m=0\sim2q-1$。根据积分封闭的知识[28]，未知颗粒尺度分布函数 $n(v,t)$ 的低阶矩完全可以通过坐标和权重来近似，且坐标和权重是完全独立于核函数和颗粒尺度分布函数的，但是与颗粒尺度分布函数的矩存在相关性，即方程(3.17)。

对于颗粒尺度分布函数，

$$n(v,t) \cong \sum_{i=1}^{q} w_i \delta(v-v_i) \tag{3.18}$$

式中：δ 为 Dirac delta 函数。

这样，采用高斯积分近似，可以把矩方程(3.7)写成如下形式：

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}M_m}{\mathrm{d}t} = & \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{q}\sum_{j=1}^{q}\beta(v_i,v_j)[(v_i+v_j)^m - v_i^m - v_j^m]w_i w_j + \sum_{i=1}^{q} S(v_i) w_i \overline{F}_i^{(m)} \\ & - \sum_{i=1}^{q} S(v_i) v_i^m w_i + J(v,t) v^m \delta(v_{\min}, v) + mE_{\mathrm{cond}} M_{m+e-1} \\ & - (A_{\mathrm{depo}} M_{m+a} + B_{\mathrm{depo}} M_{m+b})\end{aligned} \tag{3.19}$$

式中：

$$\overline{F}_i^{(m)} = \int_{v_{\min}}^{v_{\max}} \gamma(u,v) b(u) v^m \mathrm{d}v \tag{3.20}$$

对于 $2q$ 个低阶矩(从零阶矩到 $2q-1$ 阶矩)，存在 q 个离散的特征体积和 q 个离散的权重，这样自动组成了一个维度为 $2q$ 的封闭方程组，对其进行求解就可以得到离散的特征体积和权重，从而可以利用方程(3.18)和(3.17)得到颗粒尺度分布函数及其任意阶矩。

对于矩的积分转换的算法，目前已有较为成熟的算法。一般采用基于乘积差分算法(the product-difference algorithm)构建一个三对角线的雅库比矩阵(tridiagonal Jacobi matrix)来求解 v_i 和 w_i，简单介绍如下：

基于乘积差分算法，首先建立一个三角行列式 $P(i,j)$，其第一列为 $P(i,1)=\delta_{i,1}$ 即只有第一行第一列的元素等于1，其他行的第一列的元素均等于零；第二列的元素设定为 $P(i,2)=(-1)^{i-1}M_{i-1}$，并且认为 $P(1,2)=M_0=1$；其他元素则通过递归式如下计算：

$$P(i,j) = P(i,j-1)P(i+1,j-2) - P(1,j-2)P(i+1,j-1) \tag{3.21}$$

在进行矩转换时，只有第一列的元素需要考虑，根据方程(3.21)及前面的定义，有

$$\begin{cases} P(1,1) = 1 \\ P(1,2) = 1 \\ P(1,3) = M_1 \\ P(1,4) = M_2 - M_1^2, P(1,5) = M_1 M_3 - M_2^2 \\ P(1,6) = M_1(-M_2^3 + 2M_1 M_2 M_3 - M_3^2 - M_1^2 M_4 + M_2 M_4) \\ P(1,7) = M_1(M_2 - M_1^2)(-M_3^3 + 2M_2 M_3 M_4 - M_1 M_4^2 - M_2^2 M_5 + M_1 M_3 M_5) \end{cases} \tag{3.22}$$

元素 $P(1,1) \sim P(1,7)$ 包含了从 $M_0 \sim M_5$ 的 6 个低阶矩的信息，根据这些元素，产生一个新的向量 $\boldsymbol{\alpha}$，如下定义：

$$\boldsymbol{\alpha}(n) = \begin{cases} 0 & n = 1 \\ \dfrac{P(1,n+1)}{P(1,n)P(1,n-2)} & n \geqslant 2 \end{cases} \tag{3.23}$$

然后，雅可比矩阵的元素可以得到

$$a_n = \boldsymbol{\alpha}(2n) + \boldsymbol{\alpha}(2n-1)$$
$$b_n^2 = \boldsymbol{\alpha}(2n)\boldsymbol{\alpha}(2n+1)$$

式中：b_n 为 b_n^2 的正数根。

一般进行矩转换时，选择 3 个积分节点。所以一个 3×3 的对称三对角线矩阵[其主对角线为(a_1, a_2, a_3)，非对角线为(b_1, b_2)]如下：

$$\boldsymbol{J}_3 = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & \\ b_1 & a_2 & b_2 \\ & b_2 & a_3 \end{pmatrix} \tag{3.24}$$

可以根据雅可比矩阵的本征值来确定特征量和权值[29]：特征值 v_i 即为雅可比矩阵 $\boldsymbol{J}$ 的本征值，权值 w_i 为可以从对应的本征向量 $\boldsymbol{E}_i$ 中得到。

$$w_i = M_0 \frac{(\boldsymbol{E}_i \cdot \boldsymbol{e}_1)^2}{\boldsymbol{E}_i \cdot \boldsymbol{E}_i} = M_0 \boldsymbol{E}_{i1}^2, \quad \boldsymbol{e}_1 = (1,0,0)$$

式中：E_{i1} 为本征向量 $\boldsymbol{E}_i$ 的第一分量(component)。

通过以上步骤即可实现矩的积分转换。Fukuda 等[30]发布了该算法的增强版源程序，可以进行任意积分区间内的矩积分变换。Milovanovic 等[31]也对这种矩积分变换算法进行了研究。

值得注意的是，苏军伟和顾兆林等[32]通过一个调整因子增加了积分矩方法的计算能力和适用范围，如可以根据不同的要求和不同的过程来选择不同的调整子，从而跟踪所感兴趣的矩的演变过程，通过选择最优化的调整因子也有望增加 QMOM 的计算精度和计算效率。Alopaeus 等[33]发展了固定积分点的 QMOM。Upadhyay 等[34]则考察了初始选择的矩序列(moment sequence)对 QMOM 计算

精度的影响。Wang 等[35]发展的高斯积分分区累积法(bin integral method with Gauss quadrature,BIMGQ)其实也是 QMOM 的一个变种。

积分矩方法被广泛用于不同的工况,如考虑气溶胶颗粒的表面生长[27,36]、布朗凝并[36]、重力凝并[36]、同时发生的凝并和表面生长[37]、同时发生的凝并和破碎[38,39]、同时发生的凝并、成核和表面生长(仅仅单点 QMOM 就能得到精度较高的结果)[40]以及其他各种动力学事件[41,42]等。同时,也用于考虑多变量 PBE 的求解,如同时发生的颗粒凝并和烧结(同时跟踪颗粒尺度和表面积两个内部变量)[43]、湍流扩散火焰中的纳米颗粒生成(同时跟踪颗粒尺度和表面积两个内部变量)[44]、同时考虑表面生长和凝并的多组分系统[45~47],液液萃取反应器中的质量交换现象(同时跟踪液滴尺度和浓度)[48]等。这种方法也可以与多相湍流模型(主要是双流体模型[32]和拉格朗日概率密度函数模型[49])或单相流模型(一般采用 CFD[34,39,50~56])耦合起来考察多维空间系统中的非均匀结构。也有研究[57]采用 QMOM 来求解多维多变量颗粒群平衡方程。

但是,概括起来,积分矩方法有两个主要的缺点:求解多变量 PBE 的积分矩方法较为复杂,计算效率也不高;积分矩方法仅仅跟踪颗粒尺度分布函数的低阶矩,这些矩并不能真实地代表多分散性颗粒群离散系统(特别是该颗粒群具有较为复杂的颗粒尺度分布形式如多峰分布时),而且当颗粒群的内部变量(如颗粒尺度、表面积、不规则度等)与外部变量(如颗粒速度、位置等)存在强烈的相关关系式,无法利用颗粒尺度分布函数的矩来定量描述这种系统的动力学演变过程。所以,尽管 QMOM 具有考虑多变量 PBE 和多维 PBE 的能力,但是尚存在这样那样的问题。解决问题的办法可以从 QMOM 本身入手,但是鉴于其本质的局限性,更可行的办法是发展新的方法,直接积分矩方法应运而生。

3.2.3 直接积分矩方法

直接积分矩方法(the direct quadrature mothod of moments,DQMOM)是基于积分矩方法而发展起来的。它并非直接跟踪矩,而是直接跟踪矩的积分近似表达式中的特征变量和权重。我们以最简单的零维单变量颗粒群平衡方程为求解目标来说明 DQMOM 的原理。

对于零维单变量 PBE,把所有动力学事件对颗粒尺度分布函数的影响看作一个源项 $S(v,t)$,则

$$\frac{\partial n(v,t)}{\partial t} = S(v,t) \tag{3.25}$$

对方程(3.25)运用积分近似公式(3.18),可以得到

$$\sum_{i=1}^{q}\delta(v-v_i)\frac{\partial w_i}{\partial t} - \sum_{i=1}^{q}\delta'(v-v_i)\frac{\partial w_i v_i}{\partial t} + \sum_{i=1}^{q}\delta'(v-v_i)v_i\frac{\partial w_i}{\partial t} = S(v,t) \tag{3.26}$$

式中：$\delta'(v-v_i)$为$\delta(v-v_i)$的一阶偏导数。令$\zeta_i=w_iv_i$(称为权重尺度)，同时令

$$\begin{cases}\dfrac{\partial w_i}{\partial t}=a_i\\ \dfrac{\partial \xi_i}{\partial t}=\dfrac{\partial w_iv_i}{\partial t}=b_i\end{cases}\tag{3.27}$$

方程(3.26)可简写为

$$\sum_{i=1}^{q}[\delta(v-v_i)+v_i\delta'(v-v_i)]a_i-\sum_{i=1}^{q}\delta'(v-v_i)b_i=S(v,t)\tag{3.28}$$

方程(3.27)即DQMOM所直接跟踪的特征尺度和权重，为了求解这个微分方程组，必须首先得到a_i和b_i，这可以从线性方程(3.28)中入手。

因为存在如下关系式：

$$\int v^m\delta(v-v_i)\mathrm{d}v=v_i^m,\quad \int v^m\delta'(v-v_i)\mathrm{d}v=-kv_i^{m-1}\tag{3.29}$$

对方程(3.28)进行矩转换，可以得到

$$(1-m)\sum_{i=1}^{q}v_i^ma_i+m\sum_{i=1}^{q}v_i^{m-1}b_i=\overline{S}_m^{(q)}=\int_{v_{\min}}^{v_{\max}}v^mS(v,t)\mathrm{d}v\tag{3.30}$$

结合方程(3.7)，可知

$$\begin{aligned}\overline{S}_m^{(q)}&=\int_{v_{\min}}^{v_{\max}}v^mS(v,t)\mathrm{d}v=\frac{\mathrm{d}M_m}{\mathrm{d}t}\\&=\frac{1}{2}\int_{v_{\min}}^{v_{\max}}\int_{v_{\min}}^{v_{\max}}\beta(v,u)[(u+v)^m-u^m-v^m]n(v,t)n(u,t)\mathrm{d}u\mathrm{d}v\\&\quad+\left\{\int_{v_{\min}}^{v_{\max}}\int_{v}^{v_{\max}}\gamma(u,v)b(u)S(u)n(u,t)v^m\mathrm{d}u\mathrm{d}v-\int_{v_{\min}}^{v_{\max}}S(v)n(v,t)v^m\mathrm{d}v\right\}\\&\quad+J(v,t)v^m\delta(v_{\min},v)+mE_{\mathrm{cond}}M_{m+e-1}-(A_{\mathrm{depo}}M_{m+a}+B_{\mathrm{depo}}M_{m+b})\end{aligned}\tag{3.31}$$

对$\overline{S}_m^{(q)}$的求解一般可以采用乘积差分算法(PA)。

可以把线性方程(3.30)写成矩阵的形式：

$$\boldsymbol{A\alpha}=\boldsymbol{d}\tag{3.32}$$

式中：

$$\boldsymbol{\alpha}=[a_1\ \cdots\ a_q\ b_1\ \cdots\ b_q]^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{a}\\\boldsymbol{b}\end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{d}=[\overline{S}_0^{(q)}\ \cdots\ \overline{S}_{2q-1}^{(q)}]^{\mathrm{T}}$$

$$\boldsymbol{A}=[\boldsymbol{A}_1\ \ \boldsymbol{A}_2]$$

式中：

$$\boldsymbol{A}_1=\begin{bmatrix}1 & \cdots & 1\\ 0 & \cdots & 0\\ -v_1^2 & \cdots & -v_q^2\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ 2(1-q)v_1^{2q-1} & \cdots & 2(1-q)v_q^{2q-1}\end{bmatrix},$$

$$\boldsymbol{A}_2=\begin{bmatrix}0 & \cdots & 0\\ 1 & \cdots & 1\\ 2v_1 & \cdots & -2v_q\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ (2q-1)v_1^{2q-2} & \cdots & (2q-1)v_q^{2q-2}\end{bmatrix}$$

矩阵 $\boldsymbol{\alpha}$ 可以通过式(3.33)得到

$$\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{d} \tag{3.33}$$

从而可以得到 a_i 和 b_i。对这种方程进行数值求解需要注意的问题包括：选择适当的需要跟踪的颗粒尺度分布函数的矩以尽量避免 **A** 为奇异矩阵、尽量选择较少的积分节点以避免病态方程出现、尽量选择较低阶的矩以避免刚性方程出现等，具体可以参照相关文献。

一旦 a_i 和 b_i 得到，就可以转入方程组(3.27)，这是一个典型的普通微分方程组，很成熟的算法如龙格-库塔法可以对其进行求解。

DQMOM 广泛应用于多变量系统[58~60]、各向异性(多维)系统[58,61~65]，并且体现了其独特的优势，如可以与多相湍流模型进行耦合(与 QMOM 只能采用平均信息来描述颗粒属性不同，DQMOM 可以考虑不同尺度颗粒自身的属性)[64]，实现四向耦合多相湍流模型和多维颗粒群平衡模拟；如应用于多变量 PBE 时，可以避免 QMOM 的复杂非线性方程组求解(某些情况下，可能得到一些不具有真实物理意义的矩，如负数矩)[60]。

3.2.4 内插封闭矩方法

另外一种具有鲜明特色且有效的矩方法是 Frenklach 和 Harris[14] 于 1987 年首次提出的内插封闭矩方法(method of moments with interpolative closure, MOMIC)，该方法同样不需要预先知道颗粒群的尺度分布形式，计算效率非常高。其基本思想是：通过插值算法将分数矩(如 $M_{1/3}$)写成若干整数阶矩的代数形式，从而封闭矩方程组，并利用成熟算法(如龙格-库塔法)求解该普通微分方程，得到各阶矩的动力学演变过程。下面以连续区布朗凝并工况为例来阐明该方法[66]。

当仅仅考虑凝并事件时，对于离散形式的颗粒群工况(即颗粒尺度只可能为

v_1、$2v_1$、$3v_1$、…，其中 v_1 为单体体积）整数阶矩的输运方程如下：

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}M_0}{\mathrm{d}t} = -\dfrac{1}{2}\sum\limits_{i=1}^{\infty}\sum\limits_{j=1}^{\infty}\beta_{ij}N_iN_j \\ \dfrac{\mathrm{d}M_1}{\mathrm{d}t} = 0 \\ \dfrac{\mathrm{d}M_2}{\mathrm{d}t} = \sum\limits_{i=1}^{\infty}\sum\limits_{j=1}^{\infty}v_iv_j\beta_{ij}N_iN_j \\ \dfrac{\mathrm{d}M_3}{\mathrm{d}t} = 3\sum\limits_{i=1}^{\infty}\sum\limits_{j=1}^{\infty}v_iv_j^2\beta_{ij}N_iN_j \\ \cdots \end{cases} \tag{3.34}$$

式中：N_i为尺度为 $v_i(=iv_1)$的颗粒的数密度（数目浓度），整数阶矩如下定义：

$$M_r = \sum_{i=1}^{\infty} v_i^r N_i \tag{3.35}$$

方程(3.34)可以整理成如下通用形式：

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}M_0}{\mathrm{d}t} = G_0 = -\dfrac{1}{2}\sum\limits_{i=1}^{\infty}\sum\limits_{j=1}^{\infty}\beta_{ij}N_iN_j \\ \dfrac{\mathrm{d}M_1}{\mathrm{d}t} = 0 \\ \dfrac{\mathrm{d}M_r}{\mathrm{d}t} = G_r = \dfrac{1}{2}\sum\limits_{k=1}^{r-1}\dbinom{r}{k}\left(\sum\limits_{i=1}^{\infty}\sum\limits_{j=1}^{\infty}v_i^kv_j^{r-k}\beta_{ij}N_iN_j\right), \quad r = 2,3,4,\cdots \end{cases} \tag{3.36}$$

连续区布朗凝并核如下：

$$\beta_{ij}^{\mathrm{co}} = K_{\mathrm{co}}(v_i^{1/3} + v_j^{1/3})\left(\frac{1}{v_i^{1/3}} + \frac{1}{v_j^{1/3}}\right) \tag{3.37}$$

定义 $\Omega_r = M_r/M_0$，此时连续区布朗凝并工况中整数阶矩的输运方程如下：

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}M_0}{\mathrm{d}t} = -G_0^{\mathrm{co}} = -K_{\mathrm{co}}[1+\Omega_{1/3}\Omega_{-1/3}+\Omega_{-1/3}+\Omega_{1/3}\Omega_{-2/3}]M_0^2 \\ \dfrac{\mathrm{d}M_1}{\mathrm{d}t} = 0 \\ \dfrac{\mathrm{d}M_r}{\mathrm{d}t} = G_r^{\mathrm{co}} = \dfrac{1}{2}K_{\mathrm{co}}\sum\limits_{k=1}^{r-1}\dbinom{r}{k}\begin{pmatrix} 2\Omega_k\Omega_{r-k}+\Omega_{k+1/3}\Omega_{r-k-1/3}+\Omega_{k-1/3}\Omega_{r-k+1/3} \\ +\Omega_{k-1/3}\Omega_{r-k}+\Omega_k\Omega_{r-k-1/3}+\Omega_{k+1/3}\Omega_{r-k-2/3} \\ +\Omega_{k-2/3}\Omega_{r-k+1/3} \end{pmatrix}, \\ \qquad r = 2,3,4,\cdots \end{cases} \tag{3.38}$$

此时的关键问题是通过整数阶矩插值得到分数阶矩。正分数阶矩和负分数阶矩分别采用不同的形式插值得到，这样可以提高算法的计算精度[66]。对于正分数

阶矩，Frenklach[66]建议利用整数阶矩的自然对数、通过拉格朗日插值算法（Lagrange interpolation）得到

$$\log\Omega_p = L_p(\log\Omega_0, \log\Omega_1, \cdots, \log\Omega_{r_{\max}}), \quad p > 0 \tag{3.39}$$

式中：算子 L_p 代表针对参数 p 的拉格朗日插值；$r_{\max}$ 为所考虑的最大整数阶矩，Frenklach 等[14,66]建议采用五阶插值，即在方程中考虑 0～5 阶矩的输运方程，且插值时采用如下形式：

$$\log\Omega_p = L_p(\log\Omega_0, \log\Omega_1, \log\Omega_2, \log\Omega_3, \log\Omega_4 \log\Omega_5), \quad p > 0 \tag{3.40}$$

对于负分数阶矩，Frenklach 等[66]建议如下二阶插值形式：

$$\log\Omega_p = L_p(\log\Omega_0, \log\Omega_1, \log\Omega_2), \quad p < 0 \tag{3.41}$$

而 Kuwan 和 Saito[67]甚至建议对于 $p<2$ 均采用方程(3.41)的插值形式，他们认为这样可以减少数据点之间的振荡从而增加精度。

Frenklach[66]总结了其他凝并核、其他动力学事件(成核、表面生长等)时的内插封闭方法。但是目前还尚未见 MOMIC 考虑破碎、表面氧化等事件。

MOMIC 数学上严密，且效率很高，一般只需要几秒就可以求解矩输运方程，这使得它在 soot 生成(如层流预混火焰[68]、层流扩散火焰、湍流火焰[69]等)、柱塞流、搅拌均匀反应器、柴油机、含碳纳米颗粒[67]、空间各向异性反应管[39]等的数值模拟方面得到了应用，Frenklach[66]对此进行了总结。这种方法的缺点在于 PSD 重建过程的非单值性(non-uniqueness)，即从已知的矩可能得到若干个形式不同但是均满足相关条件的颗粒尺度分布函数，这对于某些需要得到颗粒尺度分布函数具体形式的工况是一个较大的局限性。

另外，Barrett 和 Jheeta[9] 提出了一个不同于以上步骤、但是也可以归入 MOMIC 的方法，主要思想是把 m 阶整数据的自然对数表达成一个 p 阶多项式：

$$\ln M_m = a_0 + a_1 m + a_2 m^2 + \cdots + a_p m^p \tag{3.42}$$

通过一个 $p+1$ 维的矩输运方程(即 $m=0,1,\cdots,p$)可以得到 $p+1$ 个未知的 $a_i(i=0,1,\cdots,p)$，并通过一个标准的多项式插值算法来得到分数阶矩。这种方法较为简单快捷，缺点与以上描述的 MOMIC 相类似，即 PSD 重建过程的非单值性、多项式插值算法的振荡问题等。

3.2.5 矩方法小结

传统的矩方法一般只能针对满足特定函数形式(如对数正态分布、伽玛分布等)的颗粒尺度分布和特定核函数进行求解，并认为颗粒尺度分布已经达到“自保持(self-preserving)”状态，它计算量小(约 3～5 个普通差分方程)，但无法描述达到“自保持”状态之前的过程及非理想工况；内插封闭矩方法把 PSD 的矩的自然对

数表达成各阶矩的多项式形式，并通过多项式内插实现 PSD 重建，计算代价较小，但存在 PSD 重建过程的非单值性，内插算法复杂；矩积分方法则引入加权 delta 函数累加的方法来近似颗粒尺度谱，求解矩输运方程，可以摆脱传统 MOM 对 PSD 和核函数的诸多假设或简化，直接矩积分方法则进一步直接求解权函数和内部变量的输运方程，可以更方便地扩展以考虑空间非均匀和多变量工况，其缺点仍然是算法过于复杂。

3.3 分 区 法

分区法把颗粒尺度分布曲线进行离散，划分为有限数目的 m 个区间，认为每个区间内颗粒尺度分布满足一个统一的分布函数（如假设每个区间内颗粒满足单分散性分布），在每个区间内针对某个颗粒属性的分布函数，建立平衡方程，联立求解这些平衡方程，可以得到某个颗粒属性的分布函数随时间的演变过程。

一般来说，为了封闭颗粒群平衡方程右边凝并和破碎项的积分形式，有两种方法，一种方法是采用基于核函数的积分中值定理（the mean value theorem on frequency），以凝并事件为例，此时尺度为 z_i（其区间范围为 $v_i \sim v_{i+1}$）的颗粒与尺度为 z_k 的颗粒（其区间范围为 $v_k \sim v_{k+1}$）的凝并事件的对尺度为 $z_i + z_k$ 的颗粒在数目浓度上的产生源项为

$$\int_{v_i}^{v_{i+1}}\int_{v_k}^{v_{k+1}}\beta(v,u)n(v,t)n(u,t)\mathrm{d}v\mathrm{d}u = \beta(z_i,z_k)\int_{v_i}^{v_{i+1}}\int_{v_k}^{v_{k+1}}n(v,t)n(u,t)\mathrm{d}v\mathrm{d}u = \beta(z_i,z_k)N_i(t)N_k(t) \tag{3.43}$$

式中：$v_i \leqslant z_i \leqslant v_{i+1}$；$v_k \leqslant z_k \leqslant v_{k+1}$。

另外一种是采用基于颗粒尺度分布函数的积分中值定理（the mean value theorem on number density），此时

$$\int_{v_i}^{v_{i+1}}\int_{v_k}^{v_{k+1}}\beta(v,u)n(v,t)n(u,t)\mathrm{d}v\mathrm{d}u = \bar{n}(v_i,t)\bar{n}(v_k,t)\int_{v_i}^{v_{i+1}}\int_{v_k}^{v_{k+1}}\beta(u,v)\mathrm{d}v\mathrm{d}u \tag{3.44}$$

式中：

$$\bar{n}(v_i,t) = \frac{1}{v_{i+1}-v_i}\int_{v_i}^{v_{i+1}}n(v,t)\mathrm{d}v$$

所以按照积分近似方法的不同，分区法可以分为两类：采用核积分中值定理的分区法和采用数密度积分中值定理的分区法。

3.3.1 基于数密度积分中值定理的分区法

1) 传统分区法

这类分区法以 Gelbard 等[70]的工作最有影响，下面主要介绍他们的分区法的主要原理。

分区边界一般采用几何离散方法如下确定：$v_{k+1}=f_s v_k$，一般 $1.08 \leqslant f_s \leqslant 3.0$。如果需要求解的颗粒尺度分布的初始体积范围为$[v_{\min}, v_{\max}]$，则需要的分区数目为 $m=[\lg(v_{\max}/v_{\min})]/\lg f_s$。

定义 Q_l 为第 l 个区间内颗粒某个属性的分布函数 $q(v,t)$ 的积分变量，即

$$Q_l=\int_{v_{l-1}}^{v_l} q(v,t)\mathrm{d}v=\int_{v_{l-1}}^{v_l} \alpha v^{\gamma} n_p(v,t)\mathrm{d}v \tag{3.45}$$

式中：v_l 和 v_{l-1} 分别为第 l 个尺度区间的上边界和下边界。在分区法中，基于某个选定的颗粒属性的分布函数，在每个区间内，推导出该属性的平衡方程，所有区间的平衡方程组成一个封闭的方程组。所选择的颗粒属性 x 认为与颗粒尺度相关，即 $x=f(v)$。文献[71]认为基于颗粒体积平方这个属性（v^2-based）的分区法精度最高，此时 $x=v^2$。如果仅考虑凝并机理，则对于第 l 个分区，Q_l 的平衡方程为[70]

$$\frac{\mathrm{d}Q_l}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{l-1}\sum_{j=1}^{l-1}{}^1\bar{\beta}_{i,j,l}Q_iQ_j-Q_l\sum_{i=1}^{l-1}{}^2\bar{\beta}_{i,l}Q_i-\frac{1}{2}{}^3\bar{\beta}_{l,l}Q_l^2-Q_l\sum_{i=l+1}^{m}{}^4\bar{\beta}_{i,l}Q_i \tag{3.46}$$

式中：${}^1\bar{\beta}_{i,j,l}$、${}^2\bar{\beta}_{i,l}$、${}^3\bar{\beta}_{l,l}$、${}^4\bar{\beta}_{i,l}$ 为区间内部或者跨区间的凝并系数，列于表 3.1 中，其中的 $\theta(X)$ 函数的意义为：当条件 X 满足则 $\theta(X)=1$，否则 $\theta(X)=0$。当 $l=1$ 时，方程(3.46)右边前面两项抛弃；当 $l=m$ 时，方程(3.46)右边最后一项抛弃。其中方程(3.46)右边第一项表示分别位于 i 和 j 分区的两个较小颗粒凝并而生成位于 l 区的一个较大颗粒；第二项表示第 l 区的颗粒与位于 i 区的较小颗粒凝并而导致了该 l 区颗粒的净损失；第三项为第 l 区的颗粒与位于 l 区的颗粒凝并而导致了该 l 区颗粒的净损失；第四项为第 l 区的颗粒与位于 i 区的较大颗粒凝并而导致了该 l 区颗粒的净损失。

表 3.1 分区法中区间内部和跨区间凝并系数列表

凝并系数	限制条件	表达式
${}^1\bar{\beta}_{i,j,l}$	$2\leqslant l\leqslant m, 1\leqslant i<l,$ $1\leqslant j<l,$ ${}^1\bar{\beta}_{i,j,l}={}^1\bar{\beta}_{j,i,l}$	$\int_{x_{i-1}}^{x_i}\int_{x_{j-1}}^{x_j}\frac{\theta(v_{l-1}<u+v<v_l)(u+v)^{\gamma}\beta(u,v)}{\alpha u^{\gamma}v^{\gamma}(x_i-x_{i-1})(x_j-x_{j-1})}\mathrm{d}y\mathrm{d}x$
${}^2\bar{\beta}_{i,l}$	$2\leqslant l\leqslant m, i<l,$ ${}^2\bar{\beta}_{i,l}\neq{}^2\bar{\beta}_{l,i}$	$\int_{x_{i-1}}^{x_i}\int_{x_{l-1}}^{x_l}\frac{\{\theta(u+v>v_l)u^{\gamma}-\theta(u+v<v_l)[(u+v)^{\gamma}-u^{\gamma}]\}\beta(u,v)}{\alpha u^{\gamma}v^{\gamma}(x_i-x_{i-1})(x_l-x_{l-1})}\mathrm{d}y\mathrm{d}x$

续表

凝并系数	限制条件	表达式
${}^{3}\bar{\beta}_{l,l}$	$1\leqslant l\leqslant m$	$\int_{x_{l-1}}^{x_l}\int_{x_{l-1}}^{x_l}\frac{\{\theta(u+v>v_l)(u^\gamma+v^\gamma)+\theta(u+v<v_l)\cdot[(u^\gamma+v^\gamma)-(u+v)^\gamma]\}\beta(u,v)}{\alpha u^\gamma v^\gamma(x_l-x_{l-1})(x_l-x_{l-1})}\mathrm{d}y\mathrm{d}x$
${}^{4}\bar{\beta}_{i,l}$	$1\leqslant l<m,i>l$, $\gamma>0,{}^{4}\bar{\beta}_{i,l}\neq{}^{4}\bar{\beta}_{l,i}$ $\gamma=0,{}^{4}\bar{\beta}_{i,l}={}^{4}\bar{\beta}_{l,i}$	$\int_{x_{i-1}}^{x_i}\int_{x_{l-1}}^{x_l}\frac{u^\gamma\beta(u,v)}{\alpha u^\gamma v^\gamma(x_i-x_{i-1})(x_l-x_{l-1})}\mathrm{d}y\mathrm{d}x$

针对一些特殊的凝并核工况(如布朗凝并),或者对分区方法进行一些特殊的几何限制(如等分区间或者增倍分区等),可以对凝并系数作一些简化,在文献[70]中有详述。

求解方程组(3.46)时,首先需要计算每个区间的凝并系数,每个区间需要计算的${}^{1}\bar{\beta}_{i,j,l}$为$m(m-1)/2$个,需要计算的${}^{2}\bar{\beta}_{i,l}$和${}^{4}\bar{\beta}_{i,l}$均为$m(m-1)/2$个,需要计算的${}^{3}\bar{\beta}_{l,l}$为$m$个,所以总共需要计算的凝并系数总共为$(m^3+6m^2-m)/6$个。显然如果分区数目过多,所需要的计算机内存和计算代价均急剧增长。

分区法的精度和计算代价取决于所采用的分区的数目、在具体区间内所建立的某个颗粒属性的分布函数的平衡方程以及对尺度分布的低端部分(颗粒粒径较小的部分)的处理等。但是一般来说,分区数目越多,计算代价越大,计算精度越高。

Xiong 等[72,73]、Jeong 等[74,75]发展了二维分区法,能够同时求解不规则颗粒的体积和表面积分布函数;Trautmann 等[76]、Sun 等[77]用分区法描述多组分系统,实际上均是进行多变量颗粒群平衡模拟。也有研究[74,78,79]发展了考虑颗粒分形维数的分区法。这类方法也可用在 soot 颗粒生成[77]、气溶胶生成反应器[80]、液滴喷射[81]、结晶过程[82]、静电除尘器[83]、气溶胶过程(考虑化学反应、成核、生长和凝并)[84]、气固转化过程[85]等中,可见其强大的生命力。

但是,这种基于数密度积分中值定理的分区法有一个较大的缺陷,即需要通过多重积分来计算跨区间和区间内的凝并系数,这通常是极其复杂且耗时的,即使对于某些凝并核如连续区布朗凝并核等可以进行简化[70]。特别是当把其应用到多维 PBM、多变量 PBM 等复杂工况时,以上问题相当严重。

2) 离散法

离散模拟的思路很简单,那就是对每一个尺度的颗粒粒径建立离散的普通差分方程(ODEs),描述某些机制作用下这些颗粒的数目浓度的时间演变过程,并联合求解这些离散方程组。离散法实际上是一种极端的分区法,即分区数目理论上为无穷大(实际上一般为v_{max}/v_0,v_0为最小的单体的体积),分区间隙理论上为无

穷小(实际上一般为 v_0)。这种方法不需要对颗粒的初始尺度分布作任何假设,并且可避免积分运算。但是本方法最大的问题在于计算时间和所需计算机内存的限制,因为离散差分方程的数目理论上来说是无限多的,即使把本方法的对象即颗粒群限定在一定的尺度范围,仍然有为数不少的颗粒类别。假如特定时刻颗粒平均尺度为初始时刻颗粒平均尺度的 10^5 倍,则颗粒类别至少需要划分为 10^5 个,当存在凝并事件的时候,由于需要预先计算两颗粒 v_i 和 v_j 的凝并核 β_{ij},则需要的计算机内存为 $10^5\times10^5$,也就是说大约需要 10G 内存,这对于目前的 PC 机来说比较困难。

对于同时发生的凝并和成核,假设核体(一般认为是尺度分布中颗粒粒径最小的颗粒,即 $v_{\min}$)的生成速率正比于前驱体数目浓度 $C_{\text{pre}}(t)$,可以建立如下离散差分方程组[71]:

$$\left\{\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}n_1}{\mathrm{d}t}&=J(v,t)\delta(v_{\min},v)-n_1\sum_{j=1}^{\infty}\beta_{1,j}n_j\\&=C_{\text{pre}}(0)K_{\text{nucl}}\exp(-K_{\text{nucl}}t)-n_1\sum_{j=1}^{\infty}\beta_{1,j}n_j\\\frac{\mathrm{d}n_i}{\mathrm{d}t}&=\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{i-1}\beta_{j,i-j}n_jn_{i-j}-n_i\sum_{j=1}^{\infty}\beta_{i,j}n_j\end{aligned}\right.\tag{3.47}$$

式中:K_{nucl} 为成核速率。

离散模型由于其高计算精度可以作为其他方法的一个检验标准,或者用于考察尺度分布达到自保持分布的过程,但是由于其巨大的计算代价而很少应用于工程实际。

3) 离散分区法

普通分区法[70]有着计算代价较低而计算精度尚可的优点,但是对于尺度分布的低端部分,分区法的计算精度并不高,而离散法[71]则对于尺度分布的任何部分都有着极高的计算精度,但是同时也需要很高的计算代价。如果只对尺度分布范围较为狭窄的低端部分采用离散法,而其余部分采用分区法求解,则新算法的计算代价仍然可以接受而计算精度在低端部分的缺陷将得到弥补。离散-分区法正是基于以上考虑而发展起来的,它结合了两种方法的优点,同时尽量避免了各自的缺点。由于离散法也可以看作一种极限情况的分区法,所以离散法与分区法的组合体——离散分区法——同样也可以看作一种特殊的分区法,只是它在不同的尺度谱区域采取不同的离散规则。

颗粒尺度分布被划分为 $i_{\max}$ 个离散尺度和 m 个区间,GDE 在分区尺度区域(sectional size regime,SSR)被写成某个颗粒属性(如数目、表面积、体积、质量或者颗粒体积的平方)的函数 W_k($W_k=\alpha v_k^\gamma n_k$)的形式,在离散尺度区域(discrete size regime,DSR)写成某个颗粒属性的函数 w_i($w_i=\alpha v_i^\gamma n_i$)的形式。假如仅仅考虑同

时发生的凝并和成核机理，则在离散尺度区域，核体（肯定位于离散尺度区域）的某个颗粒属性 w_1 的平衡方程写为[71,86]

$$\frac{\mathrm{d}w_1}{\mathrm{d}t}=\alpha v_{\min}^{\gamma}C_{\mathrm{pre}}(0)K_{\mathrm{nucl}}\exp(-K_{\mathrm{nucl}}t)-w_1\sum_{j=1}^{i_{\max}}\beta_{1,j}^{*}w_j-w_1\sum_{k=1}^{m}{}^{4}\beta_{1,k}^{\mathrm{D}}W_k \tag{3.48}$$

对于离散尺度区域的其他颗粒（$i=2,\cdots,i_{\max}$），w_i的平衡方程相应为[71,86]

$$\frac{\mathrm{d}w_i}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{i-1}\beta_{i-j,j}^{*}w_{i-j}w_j-w_i\sum_{j=1}^{i_{\max}}\beta_{i,j}^{*}w_j-w_i\sum_{k=1}^{m}{}^{4}\bar{\beta}_{i,k}^{\mathrm{D}}W_k \tag{3.49}$$

在分区尺度区域，对于第一个分区，W_1 的平衡方程为[71,86]

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}W_1}{\mathrm{d}t}=&\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{i_{\max}}\sum_{j=1}^{i_{\max}}{}^{1}\bar{\beta}_{i,j,1}^{\mathrm{DD}}w_iw_j-W_1\sum_{i=1}^{i_{\max}}{}^{2}\bar{\beta}_{i,1}^{\mathrm{D}}w_i+W_1\sum_{i=1}^{i_{\max}}{}^{5}\bar{\beta}_{i,1}^{\mathrm{D}}w_i-\frac{1}{2}{}^{3}\bar{\beta}_{1,1}W_1^2\\&+\frac{1}{2}{}^{6}\bar{\beta}_1W_1^2-W_1\sum_{i=2}^{m}{}^{4}\bar{\beta}_{1,i}W_i\end{aligned} \tag{3.50}$$

对于分区尺度区域的第 k 个区（$k=2,\cdots,m$），W_k的平衡方程为[71,86]

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}W_k}{\mathrm{d}t}=&\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{i_{\max}}\sum_{j=1}^{i_{\max}}{}^{1}\bar{\beta}_{i,j,k}^{\mathrm{DD}}w_iw_j+\sum_{i=1}^{i_{\max}}\sum_{p=1}^{k-1}{}^{1}\bar{\beta}_{i,p,k}^{\mathrm{D}}w_iW_p+\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{k-1}\sum_{j=1}^{k-1}{}^{1}\bar{\beta}_{i,j,k}W_iW_j\\&-W_k\sum_{i=1}^{i_{\max}}{}^{2}\bar{\beta}_{i,k}^{\mathrm{D}}w_i-W_k\sum_{i=1}^{k-1}{}^{2}\bar{\beta}_{i,k}W_i+W_k\sum_{i=1}^{i_{\max}}{}^{5}\bar{\beta}_{i,k}^{\mathrm{D}}w_i+W_k\sum_{i=1}^{k-1}{}^{5}\bar{\beta}_{i,k}W_i\\&-\frac{1}{2}{}^{3}\bar{\beta}_{k,k}W_k^2+\frac{1}{2}{}^{6}\bar{\beta}_kW_k^2-W_k\sum_{i=k+1}^{m}{}^{4}\bar{\beta}_{i,k}W_i\end{aligned} \tag{3.51}$$

以上四个方程中${}^{1}\bar{\beta}_{i,j,k}$、${}^{2}\bar{\beta}_{i,k}$、${}^{3}\bar{\beta}_k$、${}^{4}\bar{\beta}_{i,k}$与表 3.1 中区间内和跨区间凝并系数的定义相同，其他凝并系数[71,86]参照表 3.2。

表 3.2　离散分区法中的凝并系数

符号	系　数	范　围	描　述
${}^{5}\bar{\beta}_{i,k}$	$\int_{x_{k-1}}^{x_k}\frac{\theta(u+v<v_k)[(u+v)^{\gamma}-u^{\gamma}]\beta(u,v)}{\alpha u^{\gamma}v^{\gamma}(x_i-x_{i-1})(x_k-x_{k-1})}\mathrm{d}u\mathrm{d}v$	$1\leqslant i\leqslant k-1$; $2\leqslant k\leqslant m$	k 区间颗粒与小尺度分区颗粒凝并所导致的 k 区间颗粒生成
${}^{6}\bar{\beta}_k$	$\int_{x_{k-1}}^{x_k}\int_{x_{k-1}}^{x_k}\frac{\theta(u+v<v_k)[(u+v)^{\gamma}-(u^{\gamma}+v^{\gamma})]\beta(u,v)}{\alpha u^{\gamma}v^{\gamma}(x_k-x_{k-1})^2}\mathrm{d}u\mathrm{d}v$	$1\leqslant k\leqslant m$	k 区间内两颗粒凝并所导致的大 k 区间颗粒生成

续表

符号	系数	范围	描述
${}^{1}\bar{\beta}^{\mathrm{D}}_{i,j,k}$	$\int_{x_{j-1}}^{x_j} \frac{\theta(v_{k-1}<iv_1+u<v_k)(iv_1+u)^{\gamma}\beta(u,iv_1)}{\alpha(iv_1)^{\gamma}u^{\gamma}(x_j-x_{j-1})}\mathrm{d}u$	$1\leqslant i\leqslant i_{\max}$；$1\leqslant j<k$；$2\leqslant k\leqslant m$	离散颗粒与小尺度分区颗粒凝并所导致的 k 区间颗粒生成
${}^{2}\bar{\beta}^{\mathrm{D}}_{i,k}$	$\int_{x_{k-1}}^{x_k} \frac{\theta(iv_1+u>v_k)u^{\gamma}\beta(u,iv_1)}{\alpha(iv_1)^{\gamma}u^{\gamma}(x_k-x_{k-1})}\mathrm{d}u$	$1\leqslant i\leqslant i_{\max}$；$1\leqslant k\leqslant m$	k 区间颗粒与离散颗粒凝并所导致的 k 区间颗粒流失
${}^{4}\bar{\beta}^{\mathrm{D}}_{i,k}$	$\int_{x_{k-1}}^{x_k} \frac{(iv_1)^{\gamma}\beta(u,iv_1)}{\alpha(iv_1)^{\gamma}u^{\gamma}(x_k-x_{k-1})}\mathrm{d}u$	$1\leqslant i\leqslant i_{\max}$；$1\leqslant k\leqslant m$	离散颗粒与分区颗粒凝并所导致的离散区域颗粒流失
${}^{5}\bar{\beta}^{\mathrm{D}}_{i,k}$	$\int_{x_{k-1}}^{x_k} \frac{\theta(iv_1+u<v_k)[(iv_1+u)^{\gamma}-u^{\gamma}]\beta(u,iv_1)}{\alpha(iv_1)^{\gamma}u^{\gamma}(x_k-x_{k-1})}\mathrm{d}u$	$1\leqslant i\leqslant i_{\max}$；$1\leqslant k\leqslant m$	离散颗粒与 k 区间颗粒凝并所导致的大 k 区间颗粒生成
${}^{1}\bar{\beta}^{\mathrm{DD}}_{i,j,k}$	$\theta(v_{k-1}<v_1(i+j)<v_k)\beta(iv_1,jv_1)$	$1\leqslant i\leqslant i_{\max}$；$1\leqslant j\leqslant i_{\max}$；$1\leqslant k\leqslant m$	两离散颗粒凝并所导致的 k 区间颗粒生成

以上凝并系数绝大多数为积分形式，难以用计算机实现求解，需将其转化为离散形式进行求解。于溯源等[87]通过对自由分子区布朗凝并核进行二项式扩展而大大减少了分区之间的凝并系数的计算代价。

分区边界仍然如下确定：$v_{k+1}=f_s v_k$，一般 $1.08\leqslant f_s\leqslant 3.0$. 文献[71]认为基于颗粒体积平方这个属性($v^2$-based)的离散分区模型计算精度更高，且 f_s 越小，精度越高；当 $f_s=1.5$ 时，为计算精度和计算代价的最优化处。离散-分区模型的时间步长限定在 $\Delta t\leqslant 200\tau_{\mathrm{coag}}$ 以避免积分误差，其中 τ_{coag} 为颗粒特征凝并时间尺度。

离散-分区法具备较好的计算精度和计算代价，不需要假设初始颗粒尺度分布，能够模拟尺度分布的达到自保持的过程，使其在工程应用中得到了较为广泛应用。如于溯源等发展了一个二维的离散-分区模型[88]，并利用其研究氢氧扩散火焰中金属铬颗粒的生成[89]和高温气冷堆中石墨尺度的估计[90]等。但是该方法仍然继承了分区法算法复杂，难以处理多组分、多维、化学反应等工况，也无法得到颗粒的内部结构信息，如不规则度等，这些缺陷限制了其应用范围。

3.3.2 基于核积分中值定理的分区法

这种分区法可以避免区间内和跨区间凝并系数的积分计算，因此计算代价很小，它主要通过建立一些颗粒尺度谱的离散法则，并针对颗粒尺度分布函数的某几

阶矩的离散表达式，把颗粒群平衡方程这个部分积分差分方程转变为一组普通差分方程。根据离散法则和所关注的离散矩守恒方程的不同，不同研究者发展了不同的分区法，比较有影响的是 Hounslow 等[91,92]发展的离散颗粒群平衡（discretized population balance，DPB）方法、Kumar 和 Ramkrishna 发展的固定网格法（fixed pivot technique，FPT）[93]和移动网格法（moving pivot technique，MPT）[94]以及 Jacobson 等发展的半隐式（semi-implicit，SIM）方法[95]。下面一一对其进行介绍。

1）离散颗粒群平衡方法（DPB）

Hounslow 等[91]首选采用一个特殊的颗粒尺度谱几何离散规则：$v_{k+1}=2v_k$，并假设区间内的颗粒满足均匀分布。他们关注区间内颗粒数目浓度（即零阶矩）的守恒方程，并引入一个体积纠正因子 C 来保证区间内颗粒质量浓度（即一阶矩）的守恒方程也同时成立。他们建立了考虑颗粒凝并的离散颗粒数目浓度平衡方程，如下：

$$\frac{\mathrm{d}N_i}{\mathrm{d}t}=\sum_{j=1}^{i-2}C\times3\times2^{j-i}\beta_{i-1,j}N_{i-1}N_j+\frac{1}{2}\beta_{i-1,i-1}N_{i-1}^2 - N_i\sum_{j=1}^{i-1}C\times3\times2^{j-i-1}\beta_{i,j}N_j-N_i\sum_{j=i}^{\infty}\beta_{i,j}N_j \tag{3.52}$$

式中：N_i 为区间 i 内颗粒数目浓度。只有当 $C=2/3$ 时，所建立的离散方程才能内在地保证凝并过程中颗粒总质量浓度不变。所以，当 $C=2/3$ 时，可以称方程建立了颗粒尺度分布零阶矩和一阶矩的正确离散方程，但是它无法推导出其他矩的离散平衡方程，即不相容于其他矩。Hounslow 等[92]之后引入了一个改进的几何离散规则 $v_{k+1}=2^{1/b}v_k$（其中 b 为大于等于 1 的整数），并仍然建立了这个离散规则下离散区间内颗粒数目浓度的平衡方程，该方程正确预测颗粒尺度分布的高阶矩，且这种离散规则增加了 DPB 的灵活性。但是总的说来，DPB 基于一个固定且较为粗糙的几何网格，且随着时间推移精度降低。

Muhlenweg 等[85]利用这种 DPB 来描述气粒转换过程，并建立了离散区间内颗粒数目浓度、颗粒体积浓度和颗粒表面积浓度的平衡方程，以此实现多变量颗粒群平衡模拟。

2）固定网格分区法（FPT）

Kumar 和 Ramkrishna[93]采用一个灵活的颗粒尺度谱离散法则：$v_i=(x_{i-1}+x_i)/2$，其中 v_i和 v_{i+1}为区间 i 的上下限，x_i为区间 i 的代表尺度，这种离散法则可以对颗粒尺度分布曲线较为陡峭的区域（即相邻区间内颗粒数目浓度变化较大的区域）采用较细的网格，对于颗粒尺度分布曲线较为平坦的区域采用较为粗糙的网格，从而可以在一定程度上增加分区法的描述精度[93]，特别是当考虑生长事件时。

固定网格法针对区间 i 内颗粒数目浓度 N_i所建立的离散普通差分方程如下

（仅考虑凝并）：

$$\frac{\mathrm{d}N_i}{\mathrm{d}t}=\sum_{x_{i-1}\leqslant(x_j+x_k)\leqslant x_i}^{j\geqslant k}\left(1-\frac{1}{2}\delta_{j,k}\right)\eta\beta_{j,k}N_jN_k-N_i\sum_{k=1}^{\infty}\beta_{i,k}N_k \tag{3.53}$$

式中：

$$\eta=\begin{cases}\dfrac{x_{i+1}-v}{x_{i+1}-x_i}, & x_i\leqslant v\leqslant x_{i+1}\\[2mm] \dfrac{v-x_{i-1}}{x_i-x_{i-1}}, & x_{i-1}\leqslant v\leqslant x_i\end{cases} \tag{3.54}$$

Hounslow 等[91]建立的离散方程(3.52)实际上是方程(3.53)的一个特例（当$x_{i+1}=2x_i$时）。该方法的优点是颗粒尺度谱的离散方式灵活，可以根据不同需要适当调整，而且该方法也可以针对所感兴趣的矩建立其严格守恒的离散方程，从而能够得到这些矩准确的预报结果。这些特点使其得到了广泛地应用，如 Park 等[96]扩展它来描述气溶胶团聚体的生成和长大，Krallis 等[97]把其扩展到双变量情况以描述聚合物的分枝，Alexopoulos 等[98]也发展了双变量固定网格分区法来描述工业微尺度系统内的凝并和破碎，等等。

这种方法的局限性在于：当颗粒尺度谱不断扩散或缩放时，或者当某些区域内颗粒数目浓度急剧增长时，仅仅通过灵活性较好的离散准则并不能保证其准确预测颗粒尺度分布的动力学演变过程，Kumar 和 Ramkrishna[94]进一步发展了所谓的移动网格分区法。

3）移动网格分区法(MPT)

移动网格分区法的基本思路是针对区间代表尺度和区间内感兴趣的矩建立其离散方程，联立求解。仍然采用固定网格分区法所采用的通用颗粒尺度谱离散准则，针对区间 i 内颗粒数目浓度 N_i 所建立的离散普通差分方程如下（仅考虑凝并）：

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}N_i}{\mathrm{d}t}&=\sum_{v_i\leqslant(x_j+x_k)\leqslant v_{i+1}}^{j\geqslant k}\left(1-\frac{1}{2}\delta_{j,k}\right)\beta_{j,k}N_jN_k-N_i\sum_{k=1}^{\infty}\beta_{i,k}N_k\\ \frac{\mathrm{d}x_i}{\mathrm{d}t}&=\frac{1}{N_i}\sum_{v_i\leqslant(x_j+x_k)\leqslant v_{i+1}}^{j\geqslant k}\left(1-\frac{1}{2}\delta_{j,k}\right)[(x_j+x_k)-x_i]\beta_{j,k}N_jN_k\end{aligned} \tag{3.55}$$

这种方法考虑了区间内颗粒尺度分布函数的非单调性和非均匀性，且由于能够考虑某个区间内颗粒数目浓度的变化与颗粒尺度的关系而拥有对某些特殊工况较高的计算精度，同时它仍然保持了固定网格分区法的基本特点，如能够针对感兴趣的矩建立其离散平衡方程等。Tsantilis 等[99]、Spicer 等[100]利用其描述燃烧合成纳米颗粒的过程，Wen 等[101]利用其描述柱塞流反应器中 soot 生成，都取得了较好的结果，这些过程的初始阶段中，伴随有大量的核体颗粒生成。

4）半隐式分区法（SIM）

Jacobson 等[95]首先提出了一种半隐式方法，该方法同样是把颗粒尺度谱离散成若干个分区，并在每个分区内针对感兴趣的矩（如分区 i 内颗粒总数目 N_i、颗粒总体积 V_i 等）建立其离散平衡方程，以上方法中，这些分区矩的平衡方程均为普通差分方程，而在半隐式分区法中，这些分区矩的平衡方程被直接表达成代数形式，此时不需要通过大量的迭代计算就可以直接求出某时刻某个分区内各种矩，从而得到颗粒尺度分布函数的时间演变过程。

Jacobson 等[95]通过一个几何算法来离散颗粒尺度谱：

$$v_x = v_{\min} R^{x-1} \tag{3.56}$$

式中：x 为一个大于等于 1 的有理数，$k=\mathrm{int}[x]$，区间 $B_k=[v_{k-},v_{k+})$，$v_{(k-1)+}=v_{k-}$，区间 k 的代表尺度为 $v_k=(v_{k-}+v_{k+})/2$，第 k 个区间内颗粒数目浓度为 $N_k=n(v_k)(v_{k+}-v_{k-})$，其体积浓度为 $V_k=N_k v_k$。Jacobson 等[95]得到了仅仅考虑凝并事件时的体积浓度的半隐式表达式：

$$V_k^{t+\Delta t} = \frac{V_k^t + \Delta t \sum_{j=1}^{k} \sum_{i=1}^{k-1} f_{k,j,k} \beta_{i,j}^t V_i^{t+\Delta t} N_j^t}{1 + \Delta t \sum_{j=1}^{m} (1 - f_{k,j,k}) \beta_{k,j}^t N_j^t} \tag{3.57}$$

式中：m 为最大分区数目；$f_{i,j,k}$ 为凝并分区系数（coagulation partition coefficients）。

$$f_{i,j,k} = \begin{cases} \dfrac{v_{k+1}-v_i-v_j}{v_{k+1}-v_k}\dfrac{v_k}{v_i+v_j} & v_k \leqslant v_i+v_j < v_{k+1}, k<m \\ 1-f_{i,j,k-1} & v_{k-1} < v_i+v_j < v_k, k>1 \\ 1 & v_i+v_j > v_k, k=m \\ 0 & \text{其他所有情况} \end{cases} \tag{3.58}$$

这种方法保持颗粒体积（一阶矩），但是并不严格地满足颗粒尺度分布函数的平衡方程。而且，在颗粒尺度谱的高端部分（颗粒尺度较大的区域）会产生数值扩散误差，这是因为实际的颗粒尺度谱超出了设定的颗粒离散区间的缘故，当方程(3.56)中的因子 R 减小（也意味着分区数目增多）时这种扩散误差减小，但是计算代价相应增大。Fernandez-Diaz 等针对这种扩散误差对半隐式分区法进行了修正，采取的方案是：①采用几何平均计算分区代表尺度，即 $v_k=(v_{k-}v_{k+})^{1/2}$，并计算相应的凝并分区系数 $f_{i,j,k}$；②采用新的准几何离散法则，此时 $v_x=v_{\min}[1+b(x-1)]^a$，a 和 b 为恰当选取的常数。他们的改进半隐式分区法[102]以及之后的二阶和高阶半隐式分区法[103,104]可以参照相关文献。

另外，Sandu 等[105,106]提出了一种基于牛顿柯特斯积分方法的半隐式分区法，

实际上是综合利用了多点高斯积分近似和半离散方法，他宣称 Jacobson 等的方法[95]是这种方法的一个特例，且该方法更为精确。Debry 等[107]也有类似的工作。

半隐式分区法可以很方便地扩散到多组分工况（即进行多变量颗粒群平衡模拟）[95,102]，而 Mitsakou 等[108]甚至把其与 CFD 耦合起来描述肺部气溶胶沉积。

3.3.3 分区法小结

分区法通过把颗粒尺度分布曲线进行离散，针对每个离散区间建立某个颗粒尺度谱整体参数的平衡方程，然后对这些普通差分方程进行联立求解。整体而言，其缺点在于模型较为复杂，且存在明显的离散误差，其优点是能够得到颗粒尺度谱动力学演变过程的细节信息，且计算精度和计算代价较为折中。基于数密度积分中值定理的分区法通常来说柔韧性更大一些更为灵活一些，可以直接得到某区间内任意阶矩的动力学演变过程，但是往往需要通过多重积分来考虑跨区间效应（特别是计算跨区间凝并系数）；特别的是，离散法不需对颗粒初始尺度分布作任何近似，计算精度非常高，但它最大的问题在于 CPU 计算时间和计算机内存的限制；而离散分区法的计算代价仍然可以接受，而对于尺度分布的任何部分都有着较高的计算精度，尽管其模型极其复杂。基于核积分中值定理的分区法通常来说较为准确、快捷和简便，但是它只能较为精确地得到颗粒尺度分布函数某几个低阶矩的动力学演变过程。

随着计算机速度的急速增长，发展那些算法简单、易于编程实现而计算代价较高的算法，比那些算法非常复杂、难于编程实现但是计算代价较低的算法，要更有优势或者说越来越有优势，这实际上就是相当于把编程的时间转移到计算机进行计算的时间上。下面介绍的 Monte Carlo 方法即属于这种模型简单而计算代价较大的方法。

3.4 Monte Carlo 方法

以上描述的这些数值方法都是直接以 PBE 为求解对象，实际上，PBE 的建立是基于某个物理模型的。PBE 求解的主要困难在于其部分积分微分，它一般需要对颗粒尺度分布进行离散（传统矩方法除外），而 MC 方法有着天生的离散特性，正好与离散的颗粒群和离散的动力学事件不谋而合。而且它不同于以上那些直接以 PBE 本身为求解对象的方法，它直接以所描述对象（离散系统）的物理模型为基础，与描述离散群的 PBE 具备同样的假设（混沌和稀疏假设），这使得 MC 方法有望成为一种更“纯”、更“真”、更接近物理模型的一种描述颗粒尺度分布演变过程的途径。求解颗粒尺度分布的 MC 方法脱胎于气体动力学的 Boltzmann 方程的直接模拟 Monte Carlo(DSMC)方法[109]，这个算法有着坚实的理论基础[110]；沈青在其

著作[111]中对 DSMC 方法有详细描述。而文献[112]则证明，对于求解 PBE 的 MC 方法，只要如下三个条件得到满足：①所考虑的动力学事件的概率能够符合系统细节平衡准则(detailed-balance criterion)；②每个发生的事件所导致的时间步长能够恰当计算出；③能够实现组成系统的不同事件的有效的相互独立，则 MC 方法能够准确地描述颗粒尺度分布的动力学演变过程。

MC 方法的优点是能得到颗粒的轨道经历效应和历史效应，从而能够得到颗粒内部结构的细节信息，可以方便处理多组分、多分散性颗粒，算法相对较简单，易于编程实现，对于复杂的颗粒演变如结构重建(或团聚)[113]、不规则形状颗粒[114]、多维系统[114,115]、多组分系统[116]、包覆甚至化学反应等[117]均能处理。另外，求解 GDE 的 MC 方法存在着与考虑两相流场动力学演变的两相流模型兼容耦合的扩展性，此时需要基于如下基本假设[118]：在一个充分小的时间步长内，颗粒的演化过程能够解耦，分散成两个截然不同的过程，即扩散过程和凝并、破碎等事件的发生过程(实际上就是 PBE 的求解过程)。但是，MC 方法的缺点是计算代价较大，计算精度难于保证，这是由于凝并、破碎、成核、沉积等事件导致计算区域内颗粒总数目不断波动，即 MC 方法的取样空间不断变动。但是，随着计算机计算能力的增强和计算方法的改进，计算代价大和计算精度难于保证的矛盾也有望得到缓解，这使得 MC 方法的优势越来越明显。需要强调的是，目前各种求解 PBE 的 MC 方法并不是直接对单个颗粒在真实空间中依据颗粒轨道而进行随机模拟，而是通过一些随机过程来描述颗粒的各种事件发生的过程。下面介绍国际上较为流行的几类 MC 方法。

3.4.1　时间驱动 Monte Carlo 方法

从时间尺度的设定方面看，MC 方法可分为两大类，一类是基于时间驱动的 Monte Carlo 方法[119]，另外常见的一类是基于事件驱动的 Monte Carlo 方法[118]。两类方法的主要差异在于时间窗口的步进方案，如图 3.1 所示。

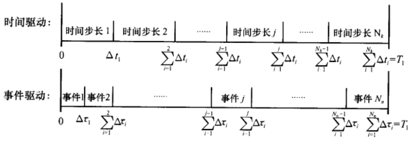


图 3.1　时间驱动和事件驱动 MC 方法示意图

基于时间驱动的 MC 方法的模拟思路就是，在设定的时间步长范围内，考虑

所有颗粒可能会发生的各种事件如凝并、破碎、成核、冷凝/蒸发等，这个时间步长要小于等于计算区域内任一颗粒平均发生一次任一事件的最小时间尺度，时间步长应当是可调的。

Liffman[119]通过一个两步方法来实现时间驱动 Monte Carlo 方法：

首先，设置时间步长 Δt。控制容积 V 内、单位时间内第 i 颗粒与其他任何不同于其的颗粒发生一次凝并的总概率为 $\mathrm{CT}_i=\sum_{j,j\neq i}\beta_{ij}\approx\sum_j\beta_{ij}$。所以，颗粒 i 在两次凝并事件之间的间隙时间（或称为静止时间）τ_i 为 $\tau_i=1/\mathrm{CT}_i=1\big/\sum_j\beta_{ij}$。当尺度分布随时间演变时，$\tau_i$ 不断变化，导致时间步长 Δt 也不是一个严格的定值。时间步长 Δt 必须实时改变，并认为是所有 τ_i 的最小值，为了增加 MC 循环次数以提高计算精度，再乘以一个小于 1 的乘积因子 α，所以时间步长一般设置为 $\Delta t^{\mathrm{new}}=\alpha\min(\tau_i\,|_{t-\Delta t^{\mathrm{old}}})$。

第二步，该 MC 方法轮流检查每颗颗粒是否将与其他颗粒发生凝并以及判断具体与哪颗颗粒发生凝并。τ_i 满足指数分布，因此单个颗粒 i 在时间步长 Δt 内与其他任意颗粒发生凝并的概率 $Pr_i(\Delta t)$ 为

$$Pr_i(\Delta t)=1-\exp\left(\frac{-\Delta t}{2\tau_i}\right)\approx\frac{\Delta t}{2\tau_i}\tag{3.59}$$

在这里，由于同一个凝并事件（如颗粒 i 和颗粒 j 发生凝并）将会被检测到两次，并且每一次凝并事件的后果处理都完全体现了一次真实的凝并事件的结果，为了避免重复统计，在分母里面添加因子“2”，这相当于把颗粒 i 的凝并概率减半。

当判断颗粒 i 是否发生凝并时，首先产生一个满足均匀分布、位于[0,1]区间的随机数 r_1（注：在本书中，所有随机数均满足均匀分布，且位于[0,1]区间，不再重复申明），然后，如果 $r_1<Pr_i(\Delta t^{\mathrm{new}})$ 满足，则认为颗粒 i 将发生凝并。

一旦确定颗粒 i 将发生凝并，接下来需要判定其凝并伙伴。首先计算这颗颗粒 i 与任何其他颗粒 j 发生凝并的概率如下：

$$P_{ij}=\frac{\beta_{ij}}{\sum\limits_{k=1,k\neq i}^{\infty}\beta_{ik}}\approx\frac{\beta_{ij}}{\sum\limits_{k=1}^{\infty}\beta_{ik}}\tag{3.60}$$

然后，如果 $\sum\limits_{k=1}^{j-1}P_{ik}\leqslant r_2\leqslant\sum\limits_{k=1}^{j}P_{ik}$，则认为 i 和 k 发生凝并。其中 Liffman[119]认为 r_2 为另外一个单独生成的随机数，而 Nanbu[120]则证明，r_2 应当等于 r_1。

在对凝并结果进行处理时，注意几点：①在一个时间步长范围内，每一颗颗粒都需要检测是否发生凝并，不管其是否检测过已经与某个颗粒发生过凝并，如果其发生凝并，则需要选择凝并伙伴；②对每一次检测到的凝并事件的处理都完全体现一次真实凝并过程，即使该凝并事件理论上将被重复检测到；③对于每一次检测到

的凝并事件，在该时间步长范围内并不立即处理其凝并结果，而是要等待所有颗粒都循环完毕再来处理凝并结果。所以每次凝并事件的结果颗粒需要储存在一个临时数列中；④当子系统内颗粒数目降低时，MC 方法将出现较大的统计误差，为了克服这个问题，当子系统内颗粒数目为初始时刻颗粒数目的一半时，由于假设子系统完全代表整体系统，可以把子系统体积扩大一倍，使得子系统内的颗粒数目恢复为初始时刻颗粒数目，保证统计误差。

假设 Θ_{mc}、Θ_{psd} 分别为 MC 方法结果和理论分析解，则可定义相对误差为：$\delta=(\Theta_{mc}-\Theta_{psd})/\Theta_{psd}$。在 Liffman[119] 的时间驱动 Monte Carlo 方法中，当子系统内颗粒数目降为原来一半时，通过拷贝现有颗粒的复制体来恢复子系统内颗粒数目，虽然这种操作对随机变量的期望值和几何标准偏差不会产生影响，但是将增大相对误差，Liffman[119] 通过数值模拟发现，相对误差符合如下关系式：$\delta<2/N(t)^{1/2}$，$N(t)$ 为子系统内模拟颗粒数目。

时间驱动 MC 方法需要明确的时间窗口离散，且认为一个时间步长范围内所有动力学事件之间能够互相解耦而相互独立，每个时间步长内可能同时发生几个动力学事件，也可能没有任何动力学事件发生，几个动力学事件之间被单独处理，而实际过程中这些动力学事件可能互相耦合，这导致时间驱动 MC 方法的计算精度和计算效率的降低。但是由于几乎所有的两相湍流模型的数值求解均是基于时间驱动的模式，所以时间驱动 MC 方法能够方便地与两相湍流模型耦合起来以描述复杂系统的细节演变过程，具有描述颗粒尺度分布空间扩散、边界条件以及颗粒拉格朗日轨迹跟踪的良好扩展性。

3.4.2 事件驱动 Monte Carlo 方法

基于事件驱动的 MC 方法的思路是，首先从对应事件的平均速率推导出该事件的发生概率，然后依据事件的发生概率来随机选定判断可能发生的事件类型，并实现该事件，然后计算两次事件之间的时间间隔（或称为静止时间），前进相应的时间长度，不断循环往复，直至稳定或者达到设定时间，如图 3.1 所示。基于事件驱动的 MC 方法不需要进行精确的时间窗口离散。它最重要的步骤是确定具体发生何种事件、计算两事件之间的时间长度和确定发生事件的主颗粒。

对于同时发生几个事件的工况，需要首先依据事件的发生概率来判断可能发生的事件类型。表 3.3 为几种常见的事件（或者过程）的平均速率[121]。假如一个系统同时存在几种事件类型，则对于某个特定事件 l，其发生的概率 $P_l=R_l/\sum_i R_i$。例如对于同时发生的凝并、破碎和成核系统，可首先计算 P_{coag}、P_{brk} 和 P_{nuc}，如果一个随机数 r 满足：$0\leqslant r\leqslant P_{coag}$，则认为将发生凝并事件，如果 $P_{coag}<r\leqslant P_{coag}+P_{brk}$，则认为将发生破碎事件；如果 $P_{coag}+P_{brk}<r\leqslant 1$，则认为将发生成核

事件。

表 3.3 几种常见事件的发生概率

事 件	$R_l/(\mathrm{m^{-3}\cdot s^{-1}})$	$r_l=\frac{R_l}{C^*}/\mathrm{s^{-1}}$	z_l	δv_l	定 义
凝并	$\frac{1}{2}\int_{v_{\min}}^{v_{\max}}\int_{v_{\min}}^{v_{\max}}\beta(u,v)n(u,t)n(v,t)\mathrm{d}u\mathrm{d}v$	$\frac{\langle k_{\mathrm{coag}ij}\rangle c^2}{2\tau_{\mathrm{coag}}}$	-1	0	$\beta_{ij}=K_{\mathrm{coag}}k_{\mathrm{coag}ij}$, $\tau_{\mathrm{coag}}=\frac{1}{(K_{\mathrm{coag}}C^*)}$, $c=\frac{C}{C^*}$
破碎	$\int_{v_{\min}}^{v_{\max}}S(u)n(u,t)\mathrm{d}u$	$\frac{\langle k_{\mathrm{brk}i}\rangle c}{\tau_{\mathrm{brk}}}$	$b-1$	0	$S_i=K_{\mathrm{brk}}k_{\mathrm{brk}i}$, $\tau_{\mathrm{brk}}=\frac{1}{K_{\mathrm{brk}}}$
冷凝/蒸发(表面生长/消融)	$C_{\mathrm{sur}}\int_{v_{\min}}^{v_{\max}}D_{\mathrm{sur}}(v,t)n(v,t)\mathrm{d}v$	$\frac{\langle k_{\mathrm{sur}i}\rangle cc_{\mathrm{sur}}}{\tau_{\mathrm{sur}}}$	0	$\pm v_{\mathrm{s}}$	$I_i=C_{\mathrm{sur}}D_{\mathrm{sur}i}$, $D_{\mathrm{sur}i}=K_{\mathrm{sur}}k_{\mathrm{sur}i}$, $\tau_{\mathrm{sur}}=\frac{1}{(K_{\mathrm{sur}}C^*)}$, $c_{\mathrm{sur}}=\frac{C_{\mathrm{sur}}}{C^*}$
成核	$V_{\mathrm{s}}J(v,t)\delta(v_{\min},v)=K_{\mathrm{nucl}}C_{\mathrm{pre}}(t)$	$\frac{c_{\mathrm{pre}}}{\tau_{\mathrm{nucl}}}$	1	v_{nuc}	$\tau_{\mathrm{nucl}}=\frac{1}{K_{\mathrm{nucl}}}$, $c_{\mathrm{pre}}=\frac{C_{\mathrm{pre}}}{C^*}$
沉积	$\int_{v_{\min}}^{v_{\max}}E(v,t)n(v,t)\mathrm{d}v$	$\frac{\langle k_{\mathrm{depo}i}\rangle c}{\tau_{\mathrm{depo}}}$	-1	$-v_{\mathrm{dep}}$	$E_i=K_{\mathrm{depo}}k_{\mathrm{depo}i}$, $\tau_{\mathrm{depo}}=\frac{1}{K_{\mathrm{depo}}}$
流入/流出	$\frac{FC_{\mathrm{fs}}}{V_{\mathrm{s}}}$	$\frac{c_{\mathrm{fs}}}{\tau_{\mathrm{fs}}}$	± 1	$\pm v_i$	$\tau_{\mathrm{fs}}=\frac{V_{\mathrm{s}}}{F}$, $c_{\mathrm{fs}}=\frac{C_{\mathrm{fs}}}{C^*}$

表 3.3 中，R_l为对应事件 l 在单位体积、单位事件内发生一次的概率；r_l为事件 l 发生概率(无量纲化)；z_l为发生一次事件 l 所导致的颗粒数目的变化量；δv_l为发生一次事件 l 所导致的颗粒质量的变化量；τ_l为对应事件 l 的特征时间尺度；C 为实际颗粒数目浓度($\mathrm{m^{-3}}$)，C^* 为特征颗粒数目浓度($\mathrm{m^{-3}}$)，一般取初始实际颗粒数目浓度；c 为无量纲的、特征化的颗粒数目浓度；K_{coag}、K_{brk}、K_{sur}、K_{depo}等分别为凝并核 β_{ij}、破碎核 S_i、冷凝/蒸发核 I_i、沉积核 E_i等的量纲部分，而 $k_{\mathrm{coag}ij}$、$k_{\mathrm{brk}i}$、$k_{\mathrm{sur}i}$、$k_{\mathrm{depo}i}$等分别为其对应的无量纲部分；b 为破碎产生的子颗粒数目；K_{nucl} 为成核速率($\mathrm{s^{-1}}$)；$C_{\mathrm{pre}}(t)$为前驱体的数目浓度($\mathrm{m^{-3}}$)；V_{s} 为离散系统体积($\mathrm{m^3}$)。

第 k 次事件与第 $k-1$ 个事件之间的时间间隔(或称为静止时间)为[122]

$$\Delta t_k=\frac{1}{V_{k-1}\sum_i R_{i,k}}=\frac{1}{\sum_i r_{i,k}}\frac{c_{k-1}}{N_{k-1}} \tag{3.61}$$

式中：V_{k-1}为 $k-1$ 时刻计算区域的体积（$=N_{k-1}/C_{k-1}$）；N_{k-1}为 $k-1$ 时刻计算区域颗粒总数目；c_{k-1}为计算区域无量纲的颗粒数目浓度（$=C_{k-1}/C^*$）。

如果仅仅只考虑颗粒凝并事件，则无需判定具体发生的事件类型，但是发生凝并事件的时间长度和凝并对的选择仍然是难点，Garcia[118]利用一个标准的 Markov 过程来描述凝并过程。

第一步，认为发生凝并事件的时间长度（即两次凝并事件之间的时间间隔）τ 是满足指数分布的随机变量。假设 W_Σ为控制容积内颗粒间的总凝并概率，$W_\Sigma=\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=i+1}^{N}\beta_{ij}=\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1,j\neq i}^{N}\beta_{ij}/2$，则 τ 满足如下分布：$P(\tau)=W_\Sigma\exp(-W_\Sigma\tau)$。此时 τ 的数学期望值为$\langle\tau\rangle=1/W_\Sigma$。第二步就是寻找凝并颗粒对。两颗颗粒 i 和 j 发生凝并的概率 P_{ij} 正比于凝并核 β_{ij}，也就是：$P_{ij}=\beta_{ij}/W_\Sigma$。这样，两个概率分布$P(\tau)$ 和 P_{ij}完全决定了 Markov 随机过程。通过求解此 Markov 随机过程可以描述颗粒的凝并过程。Garcia[118]发展了两种方法来实现颗粒的凝并过程。

方法一：倒数法（the inverse method）

该种方法也称为累积概率法（the cumulative probabilities method），适用于计算区域内颗粒数目不太多的情况。该方法分为两步。首先计算得到发生凝并事件的时间步长如下：$\tau=-\ln r/W_\Sigma$，r 为随机数。第二步是选择凝并颗粒对。对于随机数 r_2，如果 $\sum_{k=1}^{j-1}P_{ik}\leqslant r_2\leqslant\sum_{k=1}^{j}P_{ik}$，则 i 和 j 发生凝并。这种倒数法对于有着离散状态序列的概率分布是精确的。

方法二：接受-拒绝法（the acceptance-rejection method）

当计算区域内颗粒数目太多时，计算颗粒间的总凝并概率 W_Σ所耗费的计算代价将非常巨大，为了减少计算代价，Garcia[118]发展了一种算法非常简单的方法，即接受-拒绝法，该方法也分为两步。首先通过一个随机过程选定一对颗粒，如果 $r<\beta_{ij}/\max(\beta_{ij})$，则认为 i 和 j 发生凝并。如果这个关系式不能满足，则重新随机选择一对颗粒，并且采用一个新的随机过程来判断该对颗粒是否发生碰撞凝并，直到选定一对将发生凝并的颗粒对为止。如果 β_{ij} 的最大值过大，则大量拒绝事件的发生将大大降低该算法的效率。

第二步，利用 Bird[123]所发展的一种近似方法来确定两次凝并事件之间的时间间隙 τ_a，$\tau_a=\Delta t_k=1/(V_sR_{coag})\approx 2/[N(N-1)\beta_{ij}]$。此时不需要计算颗粒间的总凝并概率 W_Σ，而且凝并时间长度与发生凝并的那对颗粒相关。这种方法并不精确，但是整体而言，通常可以忽略这种误差，而且，$\langle\tau\rangle=\langle\tau_a\rangle=1/W_\Sigma$。

对于其他事件如破碎、冷凝/蒸发等，基于事件驱动的 MC 方法也可以相应解决。一般都采用接受-拒绝法来处理。对于破碎事件，如果确定下一个事件是破碎事件，则首先随机选定一颗颗粒 i，并随机产生一个随机数 r_1，如果 $r_1<S_i/$

$\max(S_i)$，则颗粒 i 发生破碎，否则重新重复以上动作，直到选定一颗发生破碎的颗粒为止。其他成核、沉积等与其类似，不再描述。

至于各种事件的后果处理，则各有不同。在一般的基于事件驱动的 MC 方法当中，不论是哪种方法，一旦选定了凝并对，则其中的一颗颗粒的尺度为两颗颗粒尺度之和，另外一颗颗粒被抛弃。在一次凝并事件之后，颗粒总数目将减 1，MC 方法的计算精度将降低，这时颗粒总凝并核之和 W_Σ 和 $\max(\beta_{ij})$ 等必须重新计算；对于有着 b 个子颗粒的破碎事件，则发生破碎的那颗母颗粒被其中一颗子颗粒取代，并新产生$(b-1)$个颗粒来逐一代表其他子颗粒。一次破碎事件之后，颗粒总数目增加$(b-1)$个，MC 方法的计算代价将增大，此时 $\max(S_i)$ 等需要重新计算；其他冷凝/蒸发、成核、沉积等事件的后果处理与此类似。

对于凝并事件的处理是所有 MC 方法最为复杂的部分，也最消耗 CPU 时间和计算机内存。Kruis 等[117]发展了一种基于事件驱动 MC 方法、采用倒数法的快速 DSMC 方法，可以在一定程度上提高 MC 方法的计算效率，该方法新颖之处在于通过临时保存每颗颗粒可能的凝并核总和 $\mathrm{CT}_i=\sum_{j,j\neq i}\beta_{ij}$ 来减少内存消耗和节省 CPU 时间。当凝并事件发生之后，考虑到发生凝并事件的两颗颗粒属性的变化，更新所有的 CT_i，从而避免时间步长计算时的双重循环和存储所有的 β_{ij} $(i,j=1,N_s)$。其他 MC 方法同样可以借鉴此种思想，当然程序的复杂性将大大提高。

在基于事件驱动的 MC 中，选择事件类型、实现事件和处理事件后果、计算静止时间等步骤不断循环进行，直到累积的时间超过了指定的时间长度。

一般的基于事件驱动的 MC 方法由于无法保持计算区域内颗粒数目而无法保持恒定的计算精度。当采用接受-拒绝法时，Garcia[118]的理论分析和 Kruis[117]的数值实验都表明其存在较明显的数值误差，且对于颗粒粒径范围分布较宽时，随机选定的颗粒对拒绝发生凝并事件的概率很高，导致该方法计算效率并不太高。而当采用倒数法时，必须在每一次凝并事件之后都计算颗粒总凝并核之和 W_Σ，这将耗费极大的计算代价和计算机内存。

概括起来，事件驱动 MC 方法则依照动力学事件发生速率依次处理每一个事件，能够精确描述离散系统的动力学演变过程，也具有较高的计算效率，但是，如果事件驱动 MC 需要与基于时间驱动模式的两相湍流模型耦合起来，则算法相对来说较为复杂，且需要采用某些假设而引入算法误差。

3.4.3　常体积法

如果依据颗粒演变过程中所跟踪的模拟颗粒数目和计算区域体积是否发生变化而划分，MC 方法也可以分为两大类：一类是最常见的常体积法，即计算区域在计算过程中保持不变；另外一类为常数目法，即保持计算区域内模拟颗粒数目不变。两类方法可以形象地通过图 3.2 来理解。由于凝并、成核、沉积等事件的发

生，常体积法总计算区域内实际颗粒总数目 N 可能会发生改变，如果颗粒由于凝并、沉积等而使数目 N 减少，由于 MC 方法的计算精度与 $\sqrt{N}$ 成反比，则会降低计算精度；如果由于成核、破碎等事件使得计算区域内颗粒数目增加，由于 MC 方法的计算代价与 N 成正比或 N^2 成正比（当涉及凝并事件时），则计算代价将增大。所以常体积法存在计算精度和计算代价无法协调的矛盾。前面描述的基于事件驱动的 MC 方法[118]为常体积法，而前面描述的基于时间驱动的 MC 方法[119]则为非连续型常体积法。

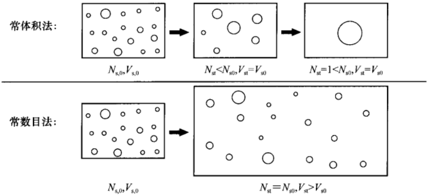


图 3.2　常数目法和常体积法的示意图

常体积法总颗粒的取样误差的量级为 $O(\sigma/N^{1/2})$，其中 N 为随时间变化的计算区域内颗粒总数目，σ 为尺度分布的标准偏差。相对误差的数学期望值为

$$E(\delta)=E\left(\frac{O(\sigma/\sqrt{N})}{\Theta_{\mathrm{psd}}}\right)=O\left(\frac{\sigma/\sqrt{N}}{\Theta_{\mathrm{psd}}}\right)=\left(\frac{\Theta_{\mathrm{psd}}-1}{N}\right)^{\frac{1}{2}}\approx\left(\frac{1}{N}\right)^{\frac{1}{2}}\tag{3.62}$$

对于纯凝并工况，第 k 个凝并事件之后，相对误差可估计为

$$\delta=\left(\frac{1}{N}\right)^{\frac{1}{2}}=\left(\frac{1}{N_0-k}\right)^{\frac{1}{2}}=\left(\frac{1}{N_0}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{v_{\mathrm{avg},k}}{v_{\mathrm{avg},0}}\right)^{\frac{1}{2}}\tag{3.63}$$

式中：$v_{\mathrm{avg},k}$、$v_{\mathrm{avg},0}$ 分别为第 k 个事件之后和初始时刻的颗粒平均质量。

常体积法在计算过程中保持计算区域不变，便于工程应用和科学定量分析，但是动力学事件的发生导致计算区域模拟颗粒数目不断波动，可能超出计算能力，也可能导致计算精度的下降，故常体积法存在计算精度和计算代价无法协调的矛盾。

3.4.4　常数目法

为了克服常体积法计算精度和计算代价无法协调的矛盾，Matsoukas 等[121,124,125]提出了常数目法，它基于事件驱动，并且随着颗粒数目的变化对计算区

域的体积实时作相应调整，以此保持调整后的计算区域内颗粒总数目不变，如图3.2所示。常数目法能够保持恒定的统计精度。

常数目法采用基于事件驱动MC方法中的接受-拒绝法来实现事件。依据事件的发生概率来判断可能发生的事件类型。静止时间的计算如下[121]：

$$\Delta t_k = \frac{1}{V_{k-1}\sum_i R_{i,k}} = \frac{1}{\sum_i r_{i,k}}\frac{c_{k-1}}{N_{k-1}} = \frac{1}{\sum_i r_{i,k}}\frac{c_{k-1}}{N} \tag{3.64}$$

常数目法不同于普通基于事件驱动MC的最大不同点在于静止时间的计算和对事件后果的处理。依据各种事件的具体后果，常数目法采用相应的算法来调整子系统的体积以保证新的子系统内颗粒数目仍然保持初始时刻的值，这个过程称为模拟颗粒数目恢复过程，这是一个随机过程。当某个事件导致子系统内颗粒总数目减少或者增多时，随机选定一个(或几个)已有的颗粒，通过复制或者抛弃这些颗粒来恢复子系统内颗粒总数目。例如，一次二元凝并事件(设发生凝并的两颗颗粒为A和B，凝并之后形成新生颗粒C)将使得数目恢复之前的子系统内模拟颗粒数目减1，此时把颗粒C取代颗粒A的位置，并从已有的模拟颗粒数列中随机选择一颗颗粒D，把颗粒D取代颗粒B的位置，这相当于随机复制了一颗颗粒；一个二元破碎事件(设发生破碎的颗粒为A，两颗子颗粒为B和C)将使得数目恢复之前的子系统内模拟颗粒数目加1，此时把颗粒B取代颗粒A的位置，并从已有的模拟颗粒中随机选择一颗颗粒D，把颗粒C取代颗粒D的位置，这相当于随机抛弃了一颗颗粒。

Matsoukas等[121]发展了两种途径来实现常数目法，即质量法(the mass method)和数目法(the number method)。

1) 质量法

在质量法进行颗粒数目恢复过程中，保持事件发生后子系统内颗粒质量浓度不受数目恢复动作中的随机选择过程的影响。注意到颗粒质量浓度为

$$m = \frac{M}{V} \tag{3.65}$$

式中：V为子系统体积；M为子系统内颗粒总质量，$M=Nv_{\text{avg}}$，N为计算区域系统颗粒总数目，v_{avg}为颗粒平均质量。

对方程(3.65)进行微分，得到

$$\frac{\Delta m_k}{m_{k-1}} = \frac{\Delta M_k}{M_{k-1}} - \frac{\Delta V_k}{V_{k-1}} = \frac{\Delta M_k}{Nv_{\text{avg},k-1}} - \frac{\Delta V_k}{V_{k-1}} \tag{3.66}$$

假如在第k个事件的数目恢复过程中，随机选择的颗粒质量为v_k，该事件导致计算区域内颗粒总质量的变化量为δv_l，颗粒数目变化为z_k，则颗粒数目恢复过程之后计算区域内颗粒总质量变化量为$\Delta M_k=\delta v_{l,k}-z_k v_k$。为了使随机增加或者

移除颗粒这个动作(即随机选择一个颗粒质量 v_k)不会对颗粒质量浓度产生影响，对于计算的体积的变化量，必须有

$$\frac{\Delta V_k}{V_{k-1}} = -\frac{z_k v_k}{N v_{\text{avg},k-1}} \tag{3.67}$$

此时，

$$\frac{\Delta m_k}{m_{k-1}} = \frac{\delta v_{l,k}}{N v_{\text{avg},k-1}} \tag{3.68}$$

颗粒质量浓度的变化量 Δm 与 v_k无关，于是

$$m_k = m_{k-1} + \Delta m = m_{k-1}\left(1 + \frac{\delta v_{l,k}}{N v_{\text{avg},k-1}}\right) \tag{3.69}$$

由于第 k 个事件之后计算区域内颗粒平均质量 $v_{\text{avg},k}$ 可在模拟中直接统计得到，于是 k 个事件之后颗粒数目浓度 $c_k = m_k / v_{\text{avg},k}$ 可以得到。下一次 MC 循环中的静止时间 Δt_{k+1} 可以利用 c_k 依据方程(3.64)计算得到。

2) 数目法

数目法则是保持事件发生后进行的颗粒数目恢复过程中保持计算区域内颗粒数目浓度不受数目恢复动作中的随机选择过程影响。通过类似的分析，可以得到 k 个事件之后颗粒的数目浓度 c_k 如下：

$$c_k = c_{k-1} + \Delta c_k = c_{k-1}\left(1 + \frac{z_k}{N}\right) \tag{3.70}$$

第 k 个事件之后子系统内颗粒平均质量 $v_{\text{avg},k}$ 可在模拟中直接统计得到，于是 k 个事件之后颗粒质量浓度 $m_k = c_k v_{\text{avg},k}$，从而可以进入下一次 MC 循环。当前这次 MC 循环的时间步长的计算是依据事件发生之前的颗粒数目浓度 c_{k-1} 等属性估计得到的。

对于一个同时发生凝并和破碎事件的工况，Matsoukas 等[121]的数值模拟结果表明，相比于数目法，质量法中的颗粒平均质量 $v_{\text{avg},k}$ 要更稳定一些。$v_{\text{avg},k}$ 的脉动是由于颗粒数目恢复过程中的随机行为所引起的，数目法对上一个时间片断中所选择的事件类型非常敏感，如果上一次选择的是凝并事件，则下一个时间片断中选择凝并的概率要低一些，对于破碎事件也是一样。质量法则对子系统中事件所导致的后果非常敏感，如果颗粒平均尺度增加，则下一个时间片断中凝并的概率就要高一些，破碎的概率要低一些，这样可以自动快速地调整 $v_{\text{avg},k}$ 的脉动。

对于纯凝并工况，Matsoukas 等[124]通过数值模拟分析了常数目法的误差。对于不同的凝并核(常数核和布朗凝并核)，相对误差 δ 服从如下经验公式：

$$\delta = \frac{\left(\ln \frac{v_{\text{avg},k}}{v_{\text{avg},0}}\right)^{0.8}}{\sqrt{2N}} \tag{3.71}$$

相比较于常体积法的相对误差 $\delta=(1/N_0)^{1/2}(v_{avg,k}/v_{avg,0})^{1/2}$，常数目法显然要小得多，特别是当凝并事件发生次数较多时。

Liffman[119]的基于时间驱动的 MC 方法可归纳为非连续型常数目法，因为它只有当子系统内颗粒数目下降一半时才恢复颗粒数目；Kruis 等[117]和 Maisels 等[126]也借鉴 Liffman 的颗粒数目恢复办法[119]，发展了阶梯式常体积法，也可归纳为非连续型常数目法；而 Matsoukas 的常数目法[121,124,125]则是连续型常数目法，它实时地恢复子系统内颗粒数目。两类方法都以收缩或者扩展子系统的体积来实现颗粒数目恢复的目的，这对于工程应用和科学定量分析会带来一定的麻烦。

总之，常数目法以缩放计算区域为代价来保证当前计算区域内模拟颗粒数目始终不变，虽然能保持稳定的计算精度和计算代价，但由于计算区域的不断变化而难以工程实际应用、难于考虑边界条件和颗粒尺度分布的空间扩散等，扩展性和实用性都较差。

3.4.5　强核函数法

以上介绍的几类 MC 方法的一个主要缺点在于当模拟颗粒数目较大时计算代价过大，这是因为处理凝并等双颗粒事件时需要对模拟颗粒群进行二重遍历，故计算代价达到了 $O(N^2)$，N 为模拟颗粒数目。但是，对于 MC 方法这种随机算法而言，减少模拟颗粒数目将导致较大的统计噪声，所以必须从算法本身而非模拟颗粒数目方面入手来解决 MC 方法计算代价加大的问题。可行的解决办法包括采用并行计算、采用临时数组或表格存储相关当地当时的凝并系数[117,127]、改进随机颗粒系统(stochastic particle system)的模拟颗粒加权策略[128]、改进算法本身以使得较少的模拟颗粒数目仍能得到较小的统计噪声[111,129]、改进算法本身以避免计算凝并系数时的二重遍历等。这里主要介绍一种强核(majorant kernal)方法，它通过引入强核函数和虚拟步进来避免对模拟颗粒群的二重遍历，可以大大地减少计算代价。

Eibeck 和 Wagner[130,131]首先发展了这种基于事件驱动、采用接受拒绝法的高效 MC 方法，并给出了这种方法严格的数学证明；而 Kraft 及其合作者[132]对这种方法进行了进一步的发展和应用。下面介绍这种方法的基本思路。

这种方法仍然把离散系统的动力学演变过程视为一个标准的 Markov 过程，即将来某一时刻的状态仅仅取决于当前时刻的状态，而与历史信息无关。这个方法的特点在于采用一个所谓的“带虚拟步进的 Markov 过程”(a Markov process with fictitious jumps)来描述离散系统动力学演变过程，其关键在于构建所谓的强核函数(majorant kernal)。以凝并事件为例，强核函数 $\hat{\beta}(u,v)$ 必须满足如下几个条件：

(1) 强凝并核函数必须大于等于正常的凝并核，即 $\hat{\beta}(u,v)\geqslant\beta(u,v)$。

(2) 引入强凝并核函数之后，计算凝并事件的速率 R_{coag} 耗费的计算代价必须较小。

(3) $\beta(u,v)/\hat{\beta}(u,v)$应该尽可能接近 1 以使得接受一个凝并事件的概率较大。

Eibeck 和 Wagner[130,131]等针对自由分子区布朗凝并核发展了线性强核函数，该强核函数不适合非球形颗粒的凝并描述，而 Goodson 和 Kraft[132]进一步针对不规则颗粒自由分子区布朗凝并核发展了新的强核函数，如下：

$$\hat{\beta}_{B}^{fm}(u,v)=\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/6}\left(\frac{6k_{B}T}{\rho_{p}}\right)^{1/2}\sqrt{2}\left(u^{2/D_{f}-1/2}+v^{2/D_{f}-1/2}+u^{2/D_{f}}v^{-1/2}+v^{2/D_{f}}u^{-1/2}\right) \tag{3.72}$$

Goodson 和 Kraft[132]进而针对这种特殊工况发展了相应的高效强核算法，计算流程如下：首先依据强核函数计算各动力学事件的速率，强核方法一般仅仅针对凝并等双颗粒事件有所不同，此时根据强凝并核来计算凝并速率，对于其他单颗粒事件和零颗粒事件可以采用传统的事件驱动方法来计算事件速率；然后依据事件速率来计算两次事件之间的等待时间和选择将要发生的动力学事件，如果发生其他单颗粒或零颗粒事件，处理方法与事件驱动 MC 方法相同，如果发生的事件为凝并事件，则首先依据强凝并核函数选择两颗模拟颗粒 i 和 j，然后，如果随机数 $r\leqslant\beta_{i,j}/\hat{\beta}_{i,j}$，则认为模拟颗粒 i 和 j 的凝并事件发生，按照普通 MC 的方法处理凝并后果，否则，认为没有真实的凝并事件发生，此时时间步长仍然前进而没有任何事件发生，即存在空事件，这种时间步进称为虚拟步进(fictitious jumps)。

Goodson 和 Kraft[132]的数值模拟结果表明这种方法的计算代价仅为 $O(N)$，相比较于普通 MC 方法的 $O(N^2)$计算代价，这无疑是一个飞跃。然而，这种虚拟步进带来的计算代价节省是以计算精度的降低为代价的，而且，并非所有的凝并核均能找到对应的强核函数，比如，对于连续区和滑流区布朗凝并核就找不到合适的强核函数，而且对于过渡区布朗凝并核，需要采取调和平均等手段来处理强核函数[133,134]。

3.4.6 质量流量法

以上时间驱动 MC 方法、事件驱动 MC 方法、常体积法、常数目法、强核函数法等均可以称为直接法(direct simulation algorithm，DSA)，即实际颗粒群被若干颗加权模拟颗粒所代表，离散系统的动力学演变过程通过随机颗粒系统(stochastic particle system)来量化，采用尺度为 v 的随机颗粒(或模拟颗粒)来近似那些尺度同样为 v 的实际颗粒，这实际上是经典的直接模拟 Monte Carlo(DSMC)的经典处理方法。此时每颗模拟颗粒均具有一个数目权值，其权值的大小即为所代表的实际颗粒团的数目。

而另外一种 MC 方法称为质量流量法(mass flow algorithm，MFA)，它仍然基

于随机颗粒系统，仍然采用随机颗粒或模拟颗粒来代表数目大得多的实际颗粒团，随机颗粒尺度与所代表的时机颗粒团尺度相同或相近，但是，MFA 中每颗模拟颗粒并非像 DSA 中那样代表尺度相同或相近的实际颗粒团的数目浓度，而是代表那些尺度相同或相近的实际颗粒团的质量浓度。

在质量流量法中，引入颗粒质量密度函数 $m=vn(v,t)$，代表单位体积内尺度为 v(或质量为 v)的颗粒的质量浓度，此时仅仅考虑凝并的 PBE 可以改写为

$$\frac{\mathrm{d}m(v,t)}{\mathrm{d}t}=\int_{v_{\min}}^{v}\frac{\beta(u,v-u)}{u}m(u,t)m(v-u,t)\mathrm{d}u-m(v,t)\int_{v_{\min}}^{v_{\max}}\frac{\beta(u,v)}{u}m(u,t)\mathrm{d}u \tag{3.73}$$

质量流量法就是对该方程进行随机求解，可以分别基于事件驱动 MC 方法[130,135]和时间驱动 MC 方法[136]来构建质量流量法，与以上描述的直接模拟算法的事件驱动 MC 方法和时间驱动 MC 方法类似，有兴趣的读者可以参照相关文献。另外，强核函数的概念同样可以引入到质量流量法中[130,135]。

质量流量法的一个鲜明特点是能够始终保持模拟过程中模拟颗粒数目恒定，从而具有稳定的计算代价和计算精度。Eibeck 和 Wagner[130]针对理论凝并核工况检验了质量流量法和直接模拟方法的性能，发现对于纯凝并工况而言，质量流量法效率更高，且随机算法的收敛性更好。Goodson 和 Kraft[137]进一步针对液液萃取过程中的破碎和凝并工况对质量流量法和直接模拟方法进行了比较，发现质量流量法无法准确地预测颗粒尺度分布函数的零阶矩(即颗粒数目浓度)的时间演变，主要是因为大量的小颗粒出现导致颗粒数目浓度的较大脉动；而对于大于 1 的高阶矩，质量流量法的计算代价更小，脉动更小。

3.4.7　Monte Carlo 方法小结

依据时间步长的计算方案可把 MC 方法分为两类。基于时间驱动的 MC 方法认为在恰当的时间步长内各种动力学事件解耦而互相独立的，这直接导致其计算效率和计算精度降低，但由于几乎所有的两相湍流模型的数值求解均是基于时间驱动的模式，所以它存在考虑颗粒尺度分布空间扩散以及颗粒拉格朗日轨迹跟踪的友好扩展性。基于事件驱动的 MC 方法能精确地描述动力学演变过程，但与两相湍流模型数值方法的时间驱动模式之间的代沟大大削弱了其扩展性。

依据颗粒演变过程中模拟颗粒数目和计算区域是否发生变化而划分，MC 方法也可以分为常体积法和常数目法。常体积法便于工程应用和科学定量分析，具有引入网格划分等技术的友好扩展性，无法保持稳定的统计精度，甚至会导致模拟颗粒的规模超出计算机所能承受的范围(如成核、破碎等使得模拟颗粒数目急剧增加)或模拟无法进行(如凝并、沉积等导致计算区域内模拟颗粒总数目减少到 1)。

常数目法根据发生的事件类型对计算区域收缩或扩展来保证计算区域内模拟颗粒总数目不变，能保持稳定的计算精度，但由于计算区域的不断变化而难于考虑边界条件和颗粒尺度分布的空间扩散等。

普通 MC 方法均依据动力学事件的实际速率来驱动程序的进行，而强核函数法则引入虚拟步进来加速 MC 方法，它最大的特点是可望实现计算代价仅随模拟颗粒数目线性增长（对于凝并工况时），缺点是计算精度有所损失，且并非所有凝并工况都能找到合适的强核函数。

实际上目前发表的 MC 方法大都同时具有以上的几个特征。如 Garcia 等[118]发展的 MC 方法为事件驱动 MC 方法和常体积法，Liffman[119]发展的 MC 方法为时间驱动 MC 方法和（阶梯式）常体积法，Maisels 等[117,126]发展的 MC 方法为事件驱动 MC 方法和（阶梯式）常体积法，Matsoukas 等[121]发展的 MC 方法属于事件驱动 MC 方法和常数目法，Eibeck 和 Wagner[130,131]发展的强核函数法属于事件驱动 MC 方法和常体积法。

以上 MC 方法均直接跟踪离散的模拟颗粒，描述不同尺度颗粒的动力学演变过程，实际上属于直接法（DSA）。需要强调的一点是，当模拟的整体系统内实际颗粒数目超过 10^7 时，由于计算机内存和 CPU 的限制，目前流行的 MC 方法均从整体系统中取样一个含有 $10^3 \sim 10^6$ 个实际颗粒的"子系统"[119]，基于颗粒场空间各向同性的假设，应用周期性边界条件，认为子系统内颗粒尺度分布演变过程可以代表整体系统内尺度分布的演变过程。子系统的引入使得这些 MC 方法难以在多维空间系统中描述颗粒尺度分布的空间扩散等。

另外一大类不同于直接法的 MC 方法是质量流量法，它跟踪的是离散的颗粒类，描述不同颗粒类的质量浓度的演变过程，它具有稳定的计算精度和计算代价，但是难以较高精度预测颗粒数目浓度的时间演变。

3.5 小　　结

颗粒群平衡方程（PBE）——或称为通用动力学方程（GDE）——基于欧拉坐标体系，从数学上建立了颗粒尺度分布函数在各种动力学事件控制下的守恒准则。但是由于方程本身的部分积分微分特性、由于所研究的颗粒群的多分散性和多维、多变量特性、由于所研究的离散系统的动力学事件的非线性核模型的复杂性等，一般的数值方法难以求解 PBE。总的说来，颗粒群模拟的数值方法可以分为几大类。如果从算法对颗粒尺度谱的分辨率进行分类，可以分为多模态模型（multi-modal models）和尺度分辨模型（size-resolved models），前者需要预先假设颗粒尺度分布函数的具体形式，如矩方法，后者则把颗粒尺度谱进行离散，在针对离散的颗粒或颗粒类进行描述，如分区法和 Monte Carlo 方法等；如果按照数值方法的所

基于坐标系统的不同，可以分为基于欧拉坐标的数值方法和基于拉格朗日坐标的数值方法，前者基于固定的坐标系对离散的颗粒群或颗粒群的统观变量（如颗粒尺度分布函数的各阶矩等）进行描述，如矩方法、分区法等，后者基于运动的坐标系统直接对离散颗粒进行跟踪，如 Monte Carlo 方法等；如果依据数值方法的理论基础划分，可以分为确定性方法和随机性方法，前者针对显式的颗粒群平衡方程或其变种（如矩方程）进行直接求解，如矩方法、分区法等，后者则以所描述的离散系统的物理模型为基础，间接求解颗粒群平衡方程，数值方法本身与欧拉形式的颗粒群平衡方程具有同样的假设，且统计上两者趋于一致，并采用随机过程来描述事件的发生，如 Monte Carlo 方法等；如果依据数值方法时间步进方式的不同，可以分为时间驱动数值方法和事件驱动数值方法，前者在运算之前事先把时间窗口进行离散，然后按照预先设定的时间步长跟踪离散颗粒群（如时间驱动 MC 方法）或对控制离散颗粒群动力学演变过程的微分方程组进行离散、迭代等（如矩方法、分区法等），后者则认为离散系统的演变过程是由一个接一个串行的动力学事件组成，每两个事件之间存在于一个静止时间，此时时间指针前进的步伐是由一个一个串行的事件所驱动的，如事件驱动 MC 方法。

目前颗粒群平衡模拟的主流数值方法主要包括矩方法、分区法和 Monte Carlo 方法。通常来说，矩方法计算量最小，算法相对简单，但是它以颗粒尺度分布函数的低阶矩为求解目标，无法得到离散颗粒群的细节信息，且利用这些低阶矩重建颗粒尺度分布函数存在诸多困难；分区法计算量较小，计算精度较高，能够协调计算代价和计算精度，但一方面存在离散误差，一方面难以求解多变量颗粒群平衡方程；Monte Carlo 方法的计算代价较大，存在统计噪声，但是其优点在于算法简单，容易处理多变量工况，可以得到离散颗粒群动力学演变过程的细节信息，且其离散本质与离散系统本身的离散本质（离散颗粒群和离散的动力学事件）相容。

综合起来，以上描述的数值方法各有其优缺点，也各有其生长的土壤，对这些方法做出一个谁优谁劣的评价是不合适的，也没有哪种方法能够一枝独秀而完全排斥其他方法。本书主要关注 Monte Carlo 方法，同时也对较流行的矩方法和分区法进行介绍。研究者需要根据各自的需求，选择适当的数值方法。

参考文献

[1] Swift D L, Friedlander S K. The coagulation of hydrosols by Brownian motion and laminar shear flow. Journal of Colloid and Interface Science, 1964, 19(7): 621—647.

[2] Hidy G M. On the theory of the coagulation of noninteracting particles in Brownian motion. Journal of Colloid Science, 1965, 20(2): 123—144.

[3] Friedlander S K, Wang C S. The self-preserving particle size distribution for coagulation by Brownian motion. Journal of Colloid Science, 1966, 22(2): 126—132.

[4] Hidy G M, Lilly D K. Solutions to the equations for the kinetics of coagulation. Journal of Colloid Science, 1965, 20(8): 867—874.

[5] Vemury S, Kusters K A, Pratsinis S E. Time-lag for attainment of the self-preserving particle size distribution by coagulation. Journal of Colloid and Interface Science, 1994, 165 (1): 53—59.

[6] Park S H, Lee K W. Analytical solution to change in size distribution of polydisperse particles in closed chamber due to diffusion and sedimentation. Atmospheric Environment, 2002, 36(35): 5459—5467.

[7] Seinfeld J H, Pandis S N. Atmospheric Chemistry and Physics. New York: Wiley-Interscience, 1998.

[8] Barrett J C, Webb N A. A comparison of some approximate methods for solving the aerosol general dynamic equation. Journal of Aerosol Science, 1988, 29(1-2): 31—39.

[9] Barrett J C, Jheeta J S. Improving the accuracy of the moments method for solving the aerosol general dynamic equation. Journal of Aerosol Science, 1996, 27(8): 1135—1142.

[10] 赵海波，郑楚光，徐明厚. 离散系统通用动力学方程求解算法的研究进展. 力学进展，2006, 36(1): 125—141.

[11] Lee K W, Lee Y J, Han D S. The log-normal size distribution theory for Brownian coagulation in the low Knudsen number regime. Journal of Colloid and Interface Science, 1997, 188(2): 486—492.

[12] Williams M M R. Some exact and approximate solutions of the nonlinear Boltzmann equation with applications to aerosol coagulation. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, 1981, 14(8): 2073—2089.

[13] Friedlander S K. Smoke, Dust and Haze: Fundamentals of Aerosol Behavior. New York: Wiley, 1997.

[14] Frenklach M, Harris S J. Aerosol dynamics modeling using the method of moments. Journal of Colloid and Interface Science, 1987, 118 (1): 252—261.

[15] Lee K W. Change of Particle size distribution during Brownian coagulation. Journal of Colloid and Interface Science, 1983, 92(2): 315—325.

[16] Park S H, Xiang R, Lee K W. Brownian coagulation of fractal agglomerates: Analytical solution using the log-Normal size distribution assumption. Journal of Colloid and Interface Science, 2000, 231(1): 129—135.

[17] Park S H, W L K. Asymptotic particle size distributions attained during coagulation processes. Journal of Colloid and Interface Science, 2001, 233(1): 117—123.

[18] Park S H, Lee K W, Otto E, et al. The log-normal size distribution theory of brownian aerosol coagulation for the entire particle size range. Part I: Analytical solution using the harmonic mean coagulation kernel. Journal of Aerosol Science, 1999, 30(1): 3—16.

[19] Park S H, Lee K W. Change in particle size distribution of fractal agglomerates during Brownian coagulation in the free-molecule regime. Journal of Colloid and Interface Sci-

ence,2002,246(1): 85—91.

[20] Otto E, Fissan H, Park S H, et al. The log-normal size distribution theory of brownian aerosol coagulation for the entire particle size range. Part II: Analytical solution using Dahneke's coagulation kernel. Journal of Aerosol Science, 1999, 30(1): 17—34.

[21] Kim D S, H P S, Song Y M, et al. Brownian coagulation of polydisperse aerosols in the transition regime. Journal of Aerosol Science, 2003, 34(7): 859—868.

[22] Jung C H, Kim Y P, Lee K W. A moment model for simulating raindrop scavenging of aerosols. Journal of Aerosol Science, 2003, 34(9): 1217—1233.

[23] Jung C H, Kim Y P, Lee K W. Analytic solution for polydispersed aerosol dynamics by a wet removal process. Journal of Aerosol Science, 2002, 33(5): 753—767.

[24] Park S H, Lee K W, Shimada M, et al. Alternative analytical solution to condensational growth of polydisperse aerosols in the continuum regime. Journal of Aerosol Science, 2001, 32(2): 187—197.

[25] Park S H, Lee K W, Shimada M, et al. Change in particle size distribution of aerosol undergoing condensational growth: Alternative analytical solution for the low Knudsen number regime. Journal of Aerosol Science, 2002, 33(9): 1297—1307.

[26] Kim S H, Park H S, Lee K W. Theoretical model of electrostatic precipitator performance for collecting polydisperse particles. Journal of Electrostatics, 2001, 50(3): 177—190.

[27] McGraw R. Description of aerosol dynamic by the quadrature method of moments. Aerosol Science and Technology, 1997, 27(2): 255—265.

[28] Lanczos C. Applied Analysis. New York: Dover, 1988.

[29] Press W H, Teukolsky S A. Orthogonal polynomials and Gaussian quadrature with nonclassical weight functions. Computers in Physics, 1990, 4: 423—426.

[30] Fukuda H, Katuya M, Alt E O, et al. Gaussian quadrature rule for arbitrary weight function and interval. Computer Physics Communications, 2005, 167(2): 143—150.

[31] Milovanovic G V, Spalevic M M, Cvetkovic A S. Calculation of Gaussian-type quadratures with multiple nodes. Mathematical and Computer Modelling, 2004, 39(2-3): 325—347.

[32] Su J, Gu Z, Li Y, et al. Solution of population balance equation using quadrature method of moments with an adjustable factor. Chemical Engineering Science, 2007, 62(21): 5897—5911.

[33] Alopaeus V, Laakkonen M, Aittamaa J. Numerical solution of moment-transformed population balance equation with fixed quadrature points. Chemical Engineering Science, 2006, 61(15): 4919—4929.

[34] Upadhyay R R, Ezekoye O A. Treatment of size-dependent aerosol transport processes using quadrature based moment methods. Journal of Aerosol Science, 2006, 37(7): 799—819.

[35] Wang L-P, Xue Y, Grabowski W W. A bin integral method for solving the kinetic collection equation. Journal of Computational Physics, 2007, 226(1): 59—88.

[36] Barrett J C, Webb N A. A comparison of some approximate methods for solving the aerosol general dynamic equation. Journal of Aerosol Science, 1998, 29(1-2): 31—39.

[37] Marchisio D L, Pikturna J T, Fox R O, et al. Quadrature method of moments for population balance equations. AIChE Journal, 2003, 49(5): 1266—1276.

[38] Marchisio D L, Vigil R D, Fox R O. Quadrature method of moments for aggregation breakage processes. Journal of Colloid and Interface Science, 2003, 258(2): 322—334.

[39] Diemer R B, Ehrman S H. Pipeline agglomerator design as a model test case. Powder Technology, 2005, 156(2-3): 129—145.

[40] Upadhyay R R, Ezekoye O A. Evaluation ofthe 1-point quadrature approximation in QMOM for combined aerosol growth laws. Journal of Aerosol Science, 2003, 34(12): 1665—1683.

[41] Motz S, Mannal S, Gilles E D. Integral approximation-an approach to reduced models for particulate processes. Chemical Engineering Science, 2004, 59(5): 987—1000.

[42] Grosch R, Briesen H, Marquardt W, et al. Generalization and Numerical Investigation of QMOM. AIChE Journal, 2007, 53(1): 207—227.

[43] Wright D, McGraw R, Rosner D E. Bivariate extension of the quadrature method of moments for modeling simultaneous coagulation and sintering particle populations. Journal of Colloid and Interface Science, 2001, 236(2): 242—251.

[44] Yu M, Lin J, Chan T. Numerical simulation of nanoparticle synthesis in diffusion flame reactor. Powder Technology, 2007, 180(1): 9—20.

[45] McGraw R, Wright D L. Chemically resolved aerosol dynamics for internal mixtures by the quadrature method of moments. Journal of Aerosol Science, 2003, 34: 189—209.

[46] Yoon C, McGraw R. Representation of generally mixed multivariate aerosols by the quadrature method of moments. I. Statistical foundation. Journal of Aerosol Science, 2004, 35(5): 561—576.

[47] Yoon C, McGraw R. Representation of generally mixed multivariate aerosols by the quadrature method of moments: II. Aerosol dynamics. Journal of Aerosol Science, 2004, 35(5): 577—598.

[48] Attarakih M M, Bart H J, Faqir N M. Numerical solution of the bivariate population balance equation for the interacting hydrodynamics and mass transfer in liquid-liquid extraction columns. Chemical Engineering Science, 2006, 61(1): 113—123.

[49] Wang L, Fox R O. Application of in situ adaptive tabulation to CFD simulation of nanoparticle formation by reactive precipitation. Chemical Engineering Science, 2003, 58(19): 4387—4401.

[50] Wang L, Vigil R D, Fox R O. CFD simulation of shear-induced aggregation and breakage in turbulent Taylor-Couette flow. Journal of Colloid and Interface Science, 2005, 285(1): 167—178.

[51] Wang L, Marchisio D L, Vigil R D, et al. CFD simulation of aggregation and breakage

processes in laminar Taylor-Couette flow. Journal of Colloid and Interface Science, 2005, 282(2): 380—396.

[52] Upadhyay R R, Ezekoye O A. Smoke buildup and light scattering in a cylindrical cavity above a uniform flow. Journal of Aerosol Science, 2005, 36(4): 471—493.

[53] Prat O P, Ducoste J J. Modeling spatial distribution of floc size in turbulent processes using the quadrature method of moment and computational fluid dynamics. Chemical Engineering Science, 2006, 61(1): 75—86.

[54] Dorao C A, Jakobsen H A. Numerical calculation of the moments of the population balance equation. Journal of Computational and Applied Mathematics, 2006, 196(2): 619—633.

[55] Marchisio D L, Soos M, Sefcik J, et al. Role of turbulent shear rate distribution in aggregation and breakage processes. AIChE Journal, 2006, 52(1): 158—173.

[56] Gerber A G, Mousavi A. Application of quadrature method of moments to the polydispersed droplet spectrum in transonic steam flows with primary and secondary nucleation. Applied Mathematical Modelling, 2007, 31(8): 1518—1533.

[57] Attarakih M M, Bart H J, Faqir N M. A hybrid scheme for the solution of the bivariate spatially distributed population balance equation. Chemical Engineering & Technology, 2006, 29(4): 435—441.

[58] Zucca A, Marchisio D L, Vanni M, et al. Validation of bivariate DQMOM for nanoparticle processes simulation. AIChE Journal, 2007, 53(4): 918—931.

[59] Fox R O. Bivariate direct quadrature method of moments for coagulation and sintering of particle populations. Journal of Aerosol Science, 2006, 37(11): 1562—1580.

[60] Marchisio D L, Fox R O. Solution of population balance equations using the direct quadrature method of moments. Journal of Aerosol Science, 2005, 36(1): 43—73.

[61] Gavi E, Marchisio D L, Barresi A A. CFD modelling and scale-up of confined impinging jet reactors. Chemical Engineering Science, 2007, 62(8): 2228 — 2241.

[62] Zucca A, Marchisio D L, Barresi A A, et al. Implementation of the population balance equation in CFD codes for modelling soot formation in turbulent flames. Chemical Engineering Science, 2006, 61: 87—95.

[63] Fox R O, Raman V. A multienvironment conditional probability density function model for turbulent reacting flows. Physics of Fluids, 2004, 16(12): 4551—4565.

[64] Fan R, Marchisio D L, Fox R O. Application of the direct quadrature method of moments to polydisperse gas-solid fluidized beds. Powder Technology, 2004, 139(1): 7—20.

[65] Wang L, Fox R O. Comparison of micromixing models for CFD simulation of nanoparticle formation. AIChE Journal, 2004, 50(9): 2217—2232.

[66] Frenklach M. Method of moments with interpolative closure. Chemical Engineering Science, 2002, 57(12): 2229—2239.

[67] Kuwan K, Saito K. Modeling ferrocene reactions and iron nanoparticle formation: Appli-

cation to CVD synthesis of carbon nanotubes. Proceedings of the Combustion Institute, 2007,31(2): 1857—1864.

[68] Kazakov A, Frenklach M. Dynamic modeling of soot particle coagulation and aggregation: Implementation with the method of moments and application to high-pressure laminar premixed flames. Combustion and Flame, 1998, 114(3-4): 484—501.

[69] El-Asrag H, Lu T, Law C K, et al. Simulation of soot formation in turbulent premixed flames. Combustion and Flame, 2007, 150(1-2): 108—126.

[70] Gelbard F, Tambour Y, Seinfeld J H. Sectional representations for simulating aerosol dynamics. Journal of Colloid and Interface Science, 1980, 76(2): 541—556.

[71] Landgrebe J D, Pratsinis S E. A discrete-sectional model for particulate production by gas-phase chemical reaction and aerosol coagulation in the free-molecular regime. Journal of Colloid and Interface Science, 1990, 139(1): 63—86.

[72] Xiong Y, Pratsinis S E. Formation of agglomerate particles by coagulation and sintering. Part 1: A two-dimensional solution of the population balance equation. Journal of Aerosol Science, 1993, 24(3): 283—300.

[73] Xiong Y, Akhtar M K, Pratsinis S E. Formation of agglomerate particles by coagulation and sintering. Part 2: The evolution of the morphology of aerosol-made titania, silica and silica-doped titania powders. Journal of Aerosol Science, 1993, 24(3): 301—313.

[74] Jeong J I, Choi M. A sectional method for the analysis of growth of polydisperse non-spherical particles undergoing coagulation and coalescence. Journal of Aerosol Science, 2001, 32(5): 565—582.

[75] Jeong J I, Choi M. Analysis of non-spherical polydisperse particle growth in a two-dimensional tubular reactor. Journal of Aerosol Science, 2003, 34(6): 713—732.

[76] Trautmann T, Wanner C. A fast and efficient modified sectional method for simulating multicomponent collisional kinetics. Atmospheric Environment, 1999, 33(10): 1631—1640.

[77] Sun Z, Axelbaum R L, Chao B H. A multicomponent sectional model applied to flame synthesis of nanoparticles. Proceedings of the Combustion Institute, 2002, 29(1): 1063—1069.

[78] Jackson G A. Using fractal scaling and two-dimensional particle size spectra to calculate coagulation rates for heterogeneous systems. Journal of Colloid and Interface Science, 1998, 202(1): 20—29.

[79] Li X Y, Zhang J J. Numerical simulation and experimental verification of particle coagulation dynamics for a pulsed input. Journal of Colloid and Interface Science, 2003, 262(1): 149—161.

[80] Kremer D M, Davis R W, Moore E F, et al. A numerical investigation of aerosol dynamics in a wall-less reactor. Chemical Engineering Science, 2004, 59(5): 1115—1130.

[81] Anidjar F, Tambour Y, Greenberg J B. Mass exchange between droplets during head-on

collisions of multisize sprays. International Journal of Heat and Mass Transfer, 1995, 38 (18): 3369—3383.

[82] Ginter D M, Loyalka S K. Apparent size-dependent growth in aggregating crystallizers. Chemical Engineering Science, 1996, 51(14): 3685—3695.

[83] Chungsying L, Hungsung H. A sectional model to predict performance of a plate-wire electrostatic precipitator for collecting polydisperse particles. Journal of Aerosol Science, 1998, 29(3): 295—308.

[84] Kalani A, Christofides P D. Simulation, estimation and control of size distribution in aerosol processes with simultaneous reaction, nucleation, condensation and coagulation. Computers & Chemical Engineering, 2002, 26(7-8): 1153—1169.

[85] Muhlenweg H, Gutsch A, Schild A, et al. Process simulation of gas-to-particle-synthesis via population balances: Investigation of three models. Chemical Engineering Science, 2002, 57(12): 2305—2322.

[86] Wu J J, Flagan R C. A discrete-sectional solution to the aerosol dynamic equation. Journal of Colloid and Interface Science, 1988, 123(2): 339—352.

[87] Yu S, Kennedy I M. An approximate method to calculate the collision rate of a discrete-sectional model. Aerosol Science and Technology, 1997, 27(2): 266—273.

[88] Yu S, Yoon Y, Muller-Roosen M, et al. Two-dimensional discrete-sectional model for metal aerosol dynamics in a flame. Aerosol Science and technology, 1998, 28(3): 185—196.

[89] 于溯源，吕雪峰，杨龙. 铬在氢氧扩散火焰中燃烧的颗粒行为. 工程热物理学报，2002，23(supp.): 221—224.

[90] 于溯源，华宏亮. HTR-10 氦气流中石墨颗粒尺寸的估计. 核动力工程，2001，22(5): 410—413.

[91] Hounslow M J, Ryall R L, Marshall V R. A discretized population balance for nucleation, growth, and aggregation. AIChE Journal, 1988, 34(11): 1821—1832.

[92] Litster J D, Smit D J, Hounslow M J. Adjustable discretized population balance for growth and aggregation. AIChE Journal, 1995, 41(3): 591—603.

[93] Kumar S, Ramkrishna D. On the solution of population balance equations by discretization. I: A fixed pivot technique. Chemical Engineering Science, 1996, 51(8): 1311—1332.

[94] Kumar S, Ramkrishna D. On the solution of population balance equations by discretization. II: A moving pivot technique. Chemical Engineering Science, 1996, 51(8): 1333—1342.

[95] Jacobson M Z, Turco R P, Jensen E J, et al. Modeling coagulation among particles of different composition and size. Atmospheric Environment, 1994, 28(7): 1327—1338.

[96] Park S H, Rogak S N. A novel fixed-sectional model for the formation and growth of aerosol agglomerates. Journal of Aerosol Science, 2004, 35(11): 1385—1404.

[97] Krallis A, Kiparissides C. Mathematical modeling of the bivariate molecular weight——long chain branching distribution of highly branched polymers: A population balance

approach. Chemical Engineering Science, 2007, 62(18-20): 5304—5311.

[98] Alexopoulos A H, Kiparissides C. Solution of the bivariate dynamic population balance equation in batch particulate systems: Combined aggregation and breakage. Chemical Engineering Science, 2007, 62(18-20): 5048—5053.

[99] Tsantilis S, Kammler H K, Pratsinis S E. Population balance modeling of flame synthesis of titania nanoparticles. Chemical Engineering Science, 2002, 57(12): 2139—2156.

[100] Spicer P T, Chaoul O, Tsantilis S, et al. Titania formation by $TiCl_4$ gas phase oxidation, surface growth and coagulation. Journal of Aerosol Science, 2002, 33(1): 17—34.

[101] Wen J Z, Thomson M J, Park S H, et al. Study of soot growth in a plug flow reactor using a moving sectional model. Proceedings of the Combustion Institute, 2005, 30(1): 1477—1484.

[102] Fernandez-Diaz J M, Muniz C G P, Brana M A R, et al. A modified semi-implicit method to obtain the evolution of an aerosol by coagulation. Atmospheric Environment, 2000, 34(25): 4301—4314.

[103] Fernandez-Diaz J M, Rodriguez Brana M A, Arguelles Diaz K, et al. Integrators of several orders in time to study the evolution of an aerosol by coagulation. Atmospheric Environment, 2003, 37(11): 1521—1533.

[104] Fernandez-Diaz J M, Rodriguez Brana M A, Arguelles Diaz K, et al. Second and higher order semi-implicit methods to study the evolution of an aerosol by coagulation. Journal of Aerosol Science, 2000, 31(Supplement 1): 819—820.

[105] Sandu A. A newton-cotes quadrature approach for solving the aerosol coagulation equation. Atmospheric Environment, 2002, 36(3): 583—589.

[106] Sandu A, Borden C. A framework for the numerical treatment of aerosol dynamics. Applied Numerical Mathematics, 2003, 45(4): 475—497.

[107] Debry E, Sportisse B. Solving aerosol coagulation with size-binning methods. Applied Numerical Mathematics, 2007, 57(9): 1008—1020.

[108] Mitsakou C, Helmis C, Housiadas C. Eulerian modelling of lung deposition with sectional representation of aerosol dynamics. Journal of Aerosol Science, 2005, 36(1): 75—94.

[109] Bird G A. Direct simulation and the Boltzmann equation. Physics of Fluids, 1970, 13(11): 2676—2681.

[110] Wagner W A. A convergence proof for Bird's direct simulation Monte Carlo method for the Boltzmann equation. Journal of Statistical Physics, 1992, 66(3-4): 1011—1044.

[111] 沈青. 稀薄气体动力学. 北京：国防工业出版社，2003.

[112] Fichthorn K A, Weinberg W H. Theoretical foundations of dynamical Monte Carlo simulations. Journal of Chemical Physics, 1991, 95 (2): 1090—1096.

[113] Tandon P, Rosner D E. Monte Carlo simulation of particle aggregation and simultaneous restructuring. Journal of Colloid and Interface Science, 1999, 213(2): 273—286.

[114] Rosner D E, Yu S. MC simulation of aerosol aggregation and simultaneous spheroidiza-

tion. AIChE Journal,2001,47(3): 545—561.

[115] van Peborgh Gooch J R, Hounslow M J. Monte Carlo simulation of size-enlargement mechanisms in crystallization. AIChE Journal,1996,42(7): 1864—1874.

[116] Efendiev Y,Zachariah M R. Hybrid Monte Carlo method for simulation of two-component aerosol coagulation and phase segregation. Journal of Colloid and Interface Science, 2002,249(1): 30—43.

[117] Kruis F E,Maisels A,Fissan H. Direct simulation Monte Carlo method for particle coagulation and aggregation. AIChE Journal,2000,46(9): 1735—1742.

[118] Garcia A L,van den Broek C,Aertsens M,et al. A Monte Carlo simulation of coagulation. Physica A: Statistical and Theoretical Physics,1987,143(3): 535—546.

[119] Liffman K. A direct simulation Monte-Carlo method for cluster coagulation. Journal of Computational Physics,1992,100(1): 116—127.

[120] Nanbu K. Direct simulation scheme derived from the Boltzmann equation. I: Monocomponent gases. Journal of the Physical Society of Japan,1980,49(5): 2042—2049.

[121] Lin Y,Lee K,Matsoukas T. Solution of the population balance equation using constant-number Monte Carlo. Chemical Engineering Science,2002,57(12): 2241—2252.

[122] Shah B H,Ramkrishna D,Borwanker J D. Simulation of particulate systems using the concept of the interval of quiescence. AIChE Journal,1977,23(6): 897—904.

[123] Bird G A. Molecular Gas Dyanmics. Oxford: Clarendon Press,1976.

[124] Smith M,Matsoukas T. Constant-number Monte Carlo simulation of population balances. Chemical Engineering Science,1998,53(9): 1777—1786.

[125] Lee K,Matsoukas T. Simultaneous coagulation and break-up using constant-N Monte Carlo. Powder Technology,2000,110(1-2): 82—89.

[126] Maisels A,Kruis F E,Fissan H. Direct simulation Monte Carlo for simultaneous nucleation,coagulation,and surface growth in dispersed systems. Chemical Engineering Science,2004,59(11): 2231—2239.

[127] Laurenzi I J,Bartels J D,Diamond S L. A general algorithm for exact simulation of multicomponent aggregation processes. Journal of Computational Physics,2002,177(2): 418—449.

[128] Vikhansky A,Kraft M. Conservative method for the reduction of the number of particles in the Monte Carlo simulation method for kinetic equations. Journal of Computational Physics,2005,203(2): 371—378.

[129] Rjasanow S,Schreiber T,Wagner W. Reduction of the number of particles in the stochastic weighted particle method for the Boltzmann equation. Journal of Computational Physics,1998,145(1): 382—405.

[130] Eibeck A,Wagner W. Stochastic particle approximations for Smoluchowski's coagulation equation. Annals of Applied Probability,2001,11(4): 1137—1165.

[131] Eibeck A,Wagner W. An efficient stochastic algorithm for studying coagulation dynam-

ics and gelation phenomena. SIAM Journal on Scientific Computing, 2000, 22(3): 802—821.

[132] Goodson M, Kraft M. An efficient stochastic algorithm for simulating nano-particle dynamics. Journal of Computational Physics, 2002, 183(1): 210—232.

[133] Patterson R I A, Singh J, Balthasar M, et al. Extending stochastic soot simulation to higher pressures. Combustion and Flame, 2006, 145(3): 638—642.

[134] Singh J, Patterson R, Balthasar M, et al. Modelling soot particle size distribution: Dynamics of pressure regimes. Technical Report 25, c4e Preprint-Series, Cambridge, 2004.

[135] Vikhansky A, Kraft M. Single-particle method for stochastic simulation of coagulation processes. Chemical Engineering Science, 2005, 60(4): 963—967.

[136] Debry E, Sportisse B, Jourdain B. A stochastic approach for the numerical simulation of the general dynamics equation for aerosols. Journal of Computational Physics, 2003, 184(2): 649—669.

[137] Goodson M, Kraft M. Simulation of coalescence and breakage: An assessment of two stochastic methods suitable for simulating liquid-liquid extraction. Chemical Engineering Science, 2004, 59(18): 3865—3881.

4 零维颗粒群平衡模拟的 Monte Carlo 方法

第 3 章已经提到，颗粒群平衡方程(PBE)的确定性方法存在一个天然的缺陷，即它们以基于欧拉坐标体系、连续形式的 PBE 为直接求解对象，其数值方法的连续场本质与所研究系统的离散场本质存在巨大的代沟，这些方法为了破解该方程的部分积分微分数值求解难点，往往把连续型的 PBE 转化为若干普通差分方程组，导致不可避免的离散误差，也难以分辨离散系统动力学演变过程的细节信息和颗粒群内部细节信息，且这类方法普遍存在数学模型复杂的缺点。

而 MC 方法作为一种基于拉格朗日坐标系统的算法，具有天生的离散特性，正好与所研究系统的离散本质(包括离散的颗粒和离散的动力学事件等)不谋而合，它通过直接描述离散系统的动力学演变过程来间接求解 PBE，这种拉格朗日算法的优点是能得到颗粒轨道经历效应和历史效应，从而能得到颗粒动力学演变过程的细节信息，可以以直接扩展的方式来处理高维问题(包括多组分颗粒系统、同时跟踪多个内部变量等)，算法相对简单而易于编程实现。

然而，目前已发表的各种 MC 方法均有其独特的优缺点和适用范围。时间驱动 MC 能够方便地与同样基于时间驱动模式的两相湍流模型耦合起来，以描述复杂系统的细节演变过程，具有描述颗粒尺度分布空间扩散、边界条件以及颗粒拉格朗日轨迹跟踪的良好扩展性，但是其解耦假设导致计算精度和计算效率降低。事件驱动 MC 方法高精度和高效率地描述了离散系统的动力学演变过程，但如果需要与基于时间驱动模式的两相湍流模型耦合起来以实现多维颗粒群平衡模拟，由于理论基础的代沟，需要采用某些假设而引入算法误差。传统的常体积法便于工程应用和科学定量分析，也便于与网格划分技术和两相湍流模型等耦合起来实现多维颗粒群平衡模拟，但是无法兼顾计算精度和计算代价。常数目法能保持稳定的计算精度和计算代价，但由于计算区域的不断变化而难以工程实际应用、难于考虑边界条件和颗粒尺度分布的空间扩散等，扩展性较差。强核函数法则以牺牲计算精度来换取计算代价的改进，且对于诸多工况难以找到合适的强核函数；质量流量法不能很好地描述颗粒数目浓度的时间演变。同时，目前已发表的大多数 MC 方法均限于计算机内存和 CPU 而引入“子系统”概念，由于颗粒场空间各向同性的潜在假设、周期性边界条件等限制，这些 MC 方法均只具有零维颗粒群平衡模拟的能力。而那些引入随机颗粒系统的 MC 方法大都给每颗随机颗粒赋予相同的权值，具有无法较完整地继承实际颗粒群的尺度分布信息等缺点。所以有必要发展新型的 Monte Carlo 方法，能够尽量吸取现有 MC 方法的优点并尽量克服其

缺点，这正是本章的主要内容。

本章主要介绍我们在零维颗粒群平衡模拟的随机模型方面所做的工作。我们首先发展了异数目权值虚拟颗粒策略，采用数目权值不等的虚拟颗粒群来代表实际物理颗粒群，可以抛弃子系统的概念并尽可能多地继承多分散颗粒群的尺度分布信息，然后在这种策略的直接指导下，分别发展了基于时间驱动的多重 Monte Carlo 算法和基于事件驱动的事件驱动常体积法，并建立起 MC 方法对颗粒尺度分布时间演变过程描述精度的定量评判方法，详细分析这些新型 MC 方法的计算精度和计算代价。

4.1 多重 Monte Carlo 算法的发展

4.1.1 子系统和整体系统

图 4.1 中的(a)和(b)清晰地描述了整体系统和子系统的相互关系。子系统是从整体计算区域中取样的一个子计算区域，是整体系统的指示器。假设 V、N 和 N_i 分别代表整体系统的体积、其内实际颗粒总数目、尺度为 v_i 的实际颗粒的总数目，而子系统的体积、其内实际颗粒总数目、尺度为 v_i 的实际颗粒总数目分别为 V_s、N_s 和 $N_{s,i}$。则这些参数通过如下数学关系相互联系起来：

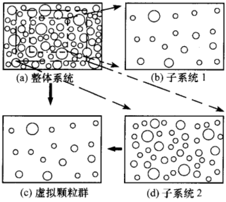


图 4.1 整体系统、子系统和虚拟颗粒群的关系示意图

$$N = \sum_i N_i, \quad N_s = \sum_i N_{s,i}, \quad \frac{N}{V} = \frac{N_s}{V_s} \tag{4.1}$$

由于子系统在颗粒尺度分布函数这个统计属性上代表了整体系统，所以子系统内颗粒总数目浓度、颗粒尺度分布等参数应该与整体系统内的相应参数相等，即

$$\frac{N_i}{N_{s,i}} \approx \frac{N}{N_s} = \frac{\sum_i N_i}{\sum_i N_{s,i}} = \frac{V}{V_s} \tag{4.2}$$

也就是说，引入子系统概念，意味着子系统内的每颗模拟颗粒代表了整体系统中的 N/N_s 颗实际颗粒，即每颗模拟颗粒具有数值为 N/N_s 的数目权值，并且不同尺度的模拟颗粒均具有公共的数目权值 w，$w=N/N_s=V/V_s$。

4.1.2 加权虚拟颗粒

在引入“子系统”的 MC 方法中，子系统内包含 $10^3 \sim 10^7$ 个模拟颗粒，每颗模拟颗粒均代表一定数目的实际颗粒，即每颗模拟颗粒均有一定的数目权值。常体积法[1]中模拟颗粒的数目权值始终不变。在常数目法[2]中，所有模拟颗粒的数目权值均随计算区域的收缩或扩展而发生同等程度的改变。

为了在模拟过程中保持计算区域体积不变以及计算区域内模拟颗粒数目不变，不同于以上 MC 方法中采用的“子系统”概念，我们的 MC 方法引入加权“虚拟颗粒”的概念。认为一组尺度相同或者相近的实际颗粒具备同样的动力学属性和行为，这些实际颗粒由一颗或几颗虚拟颗粒代表，虚拟颗粒是这些实际颗粒的指示器，虚拟颗粒的演变过程可以代表计算区域内实际颗粒的演变过程。

通过对实际的颗粒群进行处理来生成相应的虚拟颗粒群。如图 4.2 所示，假设一个计算区域存在若干颗实际颗粒，这些实际颗粒按照粒径大小可以分为几类颗粒，每类实际颗粒可以由若干个虚拟颗粒代表，虚拟颗粒的体积就是所代表的实际颗粒的体积，虚拟颗粒的数目权值 w 就是它所代表的当地实际颗粒的个数。

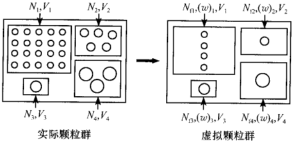


图 4.2 实际颗粒群和虚拟颗粒群关系的示意图

以图 4.2 所示系统为例来详细说明生成虚拟颗粒的过程。生成虚拟颗粒的过程实际上就是为这些虚拟颗粒赋予相应的数目权值和尺度信息的过程，所有虚拟颗粒均被编号并保存在一个虚拟颗粒数列中。

第一步，计算公共数目权值 w_a。假设计算区域内实际颗粒总数目为 N（示例系统中 $N=29$），离散的颗粒类的数目为 C（示例系统中 $C=4$），而事先设置代表这 N 颗实际颗粒的虚拟颗粒总数目为 N_{f0}（对于该示例系统，N_{f0} 被初始设置为 6），则平均每颗虚拟颗粒代表 N/N_{f0} 颗实际颗粒，即公共数目权值为 $w_a = N/N_{f0}$。数目权值并不一定要求为整数。在本示例系统中，$w_a = N/N_{f0} = 29/6 \approx 4.83$。

第二步，对这 C 个颗粒类进行循环遍历，为每类实际颗粒生成相应数目的虚拟颗粒。假设当前的颗粒类为 j，其实际颗粒总数目为 N_j，则首先计算代表该类颗粒的虚拟颗粒数目 N_{fj}：$N_{fj} = \text{integer}[N_j/w_a]$，integer[ ]表示取整。对于多分散

性颗粒群，统计其尺度分布函数时，需要获取每个颗粒类的数目浓度，代表某类颗粒的虚拟颗粒数目越多，其统计误差越小。另外一方面，当基于实际颗粒群生成虚拟颗粒群时，为了尽可能保存实际颗粒群在尺度分布函数方面的细节信息，每个颗粒类也需要具有一定数量的虚拟颗粒来代表。所以为了减少多分散性颗粒尺度谱的统计误差、为了避免实际颗粒群向虚拟颗粒群转换过程中颗粒尺度分布函数信息的丢失，通过调整虚拟颗粒数目权值使得每个颗粒区间内初始虚拟颗粒数目不少于一个最小数值 $N_{f,min}$。如果 $N_{fj}<N_{f,min}$。则强制令 $N_{fj}=N_{f,min}$。此时产生 N_{fj} 颗虚拟颗粒，依次对每颗虚拟颗粒进行编号，这些虚拟颗粒具有相同的数目权值 $(w)_j$，依照实际颗粒群向虚拟颗粒群转换过程中的质量守恒和数目守恒原则，该类虚拟颗粒的数目权值 $(w)_j=N_j/N_{fj}$，该类虚拟颗粒的尺度即等于该类实际颗粒的代表尺度 v_j。对于示例系统中的第一类颗粒，颗粒总数目 $N_1=20$，所以虚拟颗粒总数目为 $N_{f1}=\text{integer}[N_1/w_a]=\text{integer}[20/4.83]=4$，即采用 4 颗虚拟颗粒来代表这 20 颗实际颗粒，序号分别为 1～4，每颗虚拟颗粒的数目权值均等于 $(w)_1=w_1=w_2=w_3=w_4=N_1/N_{f1}=20/4=5$，而尺度均为 v_1。对于示例系统中的第三类颗粒，颗粒总数目为 1，如果根据公式 $N_{f3}=\text{integer}[N_3/w_a]=\text{integer}[1/4.83]=0$，则将不会生成虚拟颗粒来代表该类实际颗粒。在本示例系统中，令 $N_{f,min}=1$，故生成 1 颗虚拟颗粒来代表这 1 颗实际颗粒，该虚拟颗粒的序号为 6(因为有 4 颗虚拟颗粒代表第一类颗粒，1 颗虚拟颗粒代表第二类颗粒)，它的数目权值为 $w_6=(w)_3=1$，其尺度则为 v_3。

第三步，对每类实际颗粒处理完毕之后，虚拟颗粒总数目为 $N_f=\sum_j N_{fj}$，并不一定等于初始设置的虚拟颗粒总数目 N_{f0}。对于本示例系统，$N_f=7\neq N_{f0}=6$。至此，基于实际颗粒群的颗粒尺度分布函数的信息，产生了 N_f 颗虚拟颗粒来代表 N 颗实际颗粒，该 N_f 颗虚拟颗粒仍然可分为 C 个颗粒类，不同类的虚拟颗粒具有不同的初始数目权值和尺度，但是同类的虚拟颗粒具有相同的数目权值和尺度。一般来说，w 的值达到 $O(10^3)\sim O(10^4)$ 量级仍然可以保持随机算法较高的计算精度。虚拟颗粒群与实际颗粒群在颗粒尺度分布函数这个状态量上具有相同的统计意义。基于实际颗粒群的信息生成虚拟颗粒群的详细算法流程如图 4.3 所示。

加权的“虚拟颗粒”的概念的引入，有如下三个优点：①一般来说，虚拟颗粒比实际颗粒数目小得多，MC 方法跟踪这些虚拟颗粒，可以有效地减少计算代价；②如果整体系统内颗粒数目较少，或者对计算精度要求不高而允许一颗虚拟颗粒代表更多的实际颗粒，那么此时整体系统内虚拟颗粒数目可能在计算机的计算能力允许范围之内，因此 MC 方法可以抛弃子系统的假设，从而可以考虑颗粒尺度分布的空间演变过程、边界条件、甚至与两相流模型耦合起来考虑气固两相流的动力学演变过程；③在系统动力学演变过程中，按照各种事件的不同后果，通过调整参与动力学事件的相关虚拟颗粒的数目权值 w 和尺度，来体现动力学事件的后

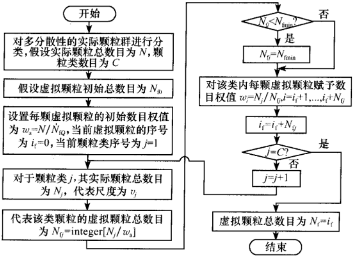


图 4.3　生成虚拟颗粒的算法流程

果，可以在保持固定计算区域的同时（即常体积法），保持计算区域内的虚拟颗粒数目不变（即常数目法），4.1.6 节～4.1.10 节将详述。实际上，在发展的 MC 算法中，只有参与动力学事件的相关虚拟颗粒的数目权值发生变化，而且其数目权值的改变依据所发生的事件的具体后果，并不一定统一改变。

4.1.3　子系统、整体系统和异数目权值虚拟颗粒群的统一

1）"等数目权值模拟颗粒群"和"异数目权值模拟颗粒群"

一般来说，由于离散系统中实际颗粒数目巨大，限于目前的计算能力，任何 MC 方法均是跟踪具有某种数目权值的模拟颗粒而非实际颗粒。采用子系统概念的 MC 方法跟踪的是"等数目权值模拟颗粒群"，而引入加权虚拟颗粒概念的 MMC 算法跟踪的是"异数目权值虚拟颗粒群"，"等数目权值模拟颗粒群"是"异数目权值模拟颗粒群"的一种特例。"异数目权值模拟颗粒群"概念的采用有如下好处：

(1) 尽可能地继承实际颗粒群的尺度分布函数的细节信息。在 MC 方法模拟开始之前均需要对实际颗粒群进行初始化、以产生模拟颗粒群。无论哪种概念被采用，MC 方法都希望所跟踪的模拟颗粒群尽可能地继承实际颗粒群在颗粒尺度分布方面的所有细节信息。对于初始单分散性颗粒群，"等数目权值模拟颗粒群策略"能够完全继承实际颗粒群尺度分布函数的细节信息。但是，对于初始多分散性颗粒群，采用"等数目权值模拟颗粒群策略"可能会丢失实际颗粒群的颗粒尺度分布函数的细节信息。如图 4.4 所示，假设实际颗粒群的尺度分布函数满足对数正态分布，实际颗粒数目为 10^6，为了对这个连续形式的 PSD 进行初始化，颗粒尺度谱被按照对数分类法则离散为 50 个区间。对于同样数目的模

拟颗粒(在这里约为 3000),如果采用"等数目权值模拟颗粒群策略",则每颗模拟颗粒代表约 333 颗实际颗粒。由于实际颗粒群中绝大部分颗粒尺度集中在几何平均尺度附近,尺度分布曲线两端的颗粒类——即较小尺度颗粒和较大尺度颗粒——的数目浓度较小,这些离散的颗粒区间内的颗粒数目可能在公共数目权值 333 之下,所以在"等数目权值模拟颗粒群策略"中不足以分配一颗模拟颗粒来代表这些颗粒区间,从而导致了颗粒尺度分布函数信息的丢失;与此不同的是,当采用"异数目权值模拟颗粒群策略"时,可以灵活地分配模拟颗粒的数目权值,从而可以保留那些数目浓度较小的颗粒区间,尽可能地复制实际颗粒群的尺度分布曲线,如图 4.4 所示。

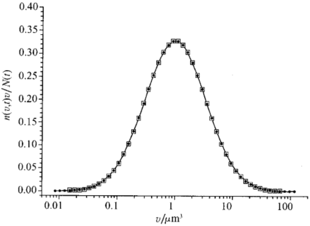


图 4.4 "等数目权值模拟颗粒群"和"异数目权值虚拟颗粒群"的颗粒尺度分布函数
—— 实际颗粒群尺度分布函数; • "异数目权值虚拟颗粒群"尺度分布函数;
□ "等数目权值模拟颗粒群"尺度分布函数

(2) 统计噪声的降低。值得强调的一点是,"等数目权值模拟颗粒群策略"的采用将可能恶化 MC 方法的统计精度。这是因为当获取颗粒尺度分布函数时,需要统计得到每个颗粒区间的数目浓度,这个统计过程的精度与该区间内模拟颗粒数目的平方根成反比,如果该颗粒区间内只有仅仅一颗或几颗模拟颗粒,则统计误差将非常大,这种情况在"等数目权值模拟颗粒群策略"中经常可以遇到,如图 4.4 中颗粒尺度谱的两端就只有几颗模拟颗粒来代表尺度分布信息。但是在"异数目权值模拟颗粒策略"中,可以调整虚拟颗粒的数目权值使得每个颗粒区间均存在相当数量的虚拟颗粒,从而尽可能减少统计误差、提高 MC 方法对颗粒尺度分布函数的描述精度。

(3) 扩展 MC 方法的应用范围。"等数目权值模拟颗粒策略"的采用将限制 MC 方法的应用范围,例如,颗粒破碎过程可能产生具有不同数目、不同尺度的子

颗粒,这些子颗粒应该采用具有不同尺度、不同数目权值的模拟颗粒来代表;成核过程也可能产生不同尺度、不同数目的核体颗粒,这种情况采用"异数目权值虚拟颗粒群策略"可以较好解决。

2) 子系统、整体系统和"异数目权值虚拟颗粒群"的统一

在本章发展的随机模型中,均采用加权虚拟颗粒的概念。虚拟颗粒群与整体系统中的实际颗粒群的联系如图 4.1 的(a)→(c)所示。此时数目少得多的虚拟颗粒群与实际颗粒群在颗粒尺度分布函数这个关键参数上具有相同的统计意义。如果虚拟颗粒数目在计算机的计算能力范围之内,子系统概念被完全抛弃;如果整体系统中实际颗粒数目太大,为了保持足够的统计精度而导致虚拟颗粒数目仍然在一个较大的量级,此时可以同时引入加权虚拟颗粒和子系统的概念,即实现子系统概念和加权虚拟颗粒概念的耦合,如图 4.1 的(a)→(d)→(c)所示,首先从整体系统中取样一个子系统,然后针对子系统内过多的模拟颗粒引入加权虚拟颗粒的概念,生成数目较少的虚拟颗粒,此时可以描述整体系统中颗粒尺度分布的时间演变。

4.1.4 多重 Monte Carlo 算法流程

新发展的 MC 方法基于时间驱动技术,同时具有常数目法和常体积法的特点,所以被命名为多重 Monte Carlo 算法(multi-Monte Carlo method, MMC 算法)。MMC 算法在设定的时间步长范围内,考虑每一颗颗粒可能的各种动力学事件。在基于时间驱动的算法中,存在如下假设:在一个足够小的 Δt 范围内,同一颗粒所参与的凝并、破碎等动力学事件能够互相解耦而相互独立,不同颗粒之间发生的动力学事件也可以互相解耦。这样,对于所描述的离散系统而言,一个时间步长内,可能存在多个不同类型的动力学事件,同一类型的动力学事件也可能存在多个,这些动力学事件之间互相独立;对于一颗特定颗粒而言,一个时间步长内,该颗粒可能同时发生几个事件,这些事件之间互相独立。所以,多重 Monte Carlo 算法可以分别单独处理每一个动力学事件,不管同一颗颗粒是否同时发生多个事件,也不管同一颗颗粒是否同时参与多个事件。MMC 算法的流程如图 4.5 所示,由于各种动力学事件的解耦关系,对各种动力学事件的处理顺序可以是随机的,不一定按照图中顺序进行,也可以仅仅考虑单种动力学事件或同时发生的多个动力学事件。

在一个时间步长内,当前跟踪颗粒即使发生了某事件(如凝并),也不会立即影响本时间步长内的这颗颗粒和相关颗粒的动力学属性,而只会在下一个时间步长内影响这颗颗粒与相关颗粒的行为属性。所以在当前时间步长内的整个颗粒循环全部结束之后,再进行该事件后果的处理。

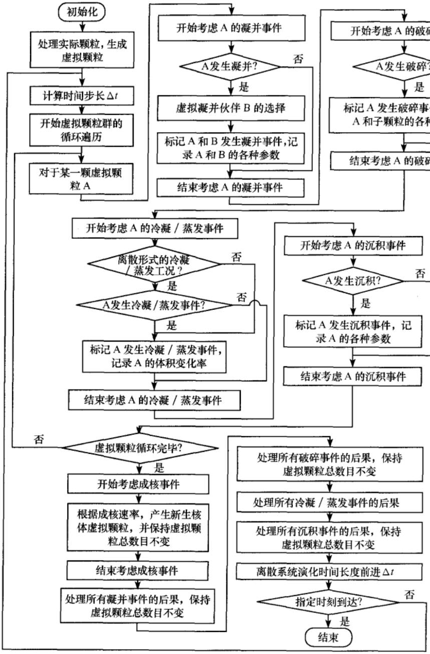


图 4.5　多重 Monte Carlo 算法流程

4.1.5　时间步长

时间步长 Δt 设置的关键在于：保证在某个 Δt 内，每颗颗粒最多只可能参与一次某一类型的事件（可以一颗颗粒在某个 Δt 内参与几个不同类型的事件），这样才不至于遗漏对颗粒参与的某一事件处理。虚拟颗粒 i 只发生一次凝并事件的时间长度称为虚拟颗粒 i 的凝并时间尺度，虚拟颗粒 i 只发生一次破碎、沉积和冷凝/蒸发等的时间尺度也依此命名，而发生一次成核事件的时间长度称为成核时间尺度。

1）虚拟颗粒 i 的凝并时间尺度

凝并事件属于双颗粒事件，即该事件涉及两颗已存在的颗粒。首先考察虚拟颗粒 i 的凝并概率。在某个计算区域 V_s 内，假设实际颗粒个数为 N，虚拟颗粒个数为 N_f，则单位时间内、单位体积内、第 i 颗虚拟颗粒所代表的实际颗粒（颗粒数目浓度为 w_i/V_s）与不同于 i 的其他虚拟颗粒 j 所代表的实际颗粒（颗粒数目浓度为 w_j/V_s）之间发生凝并事件的次数（单位为 $m^{-3}\cdot s^{-1}$）为

$$N_{c,ij}=\beta_{ij}\frac{w_i}{V_s}\frac{w_j}{V_s}\tag{4.3}$$

式中：β_{ij} 为颗粒 i 和 j 的凝并核。

单位时间单位体积内第 i 颗虚拟颗粒所代表的实际颗粒内部发生的凝并事件的次数（单位为 $m^{-3}\cdot s^{-1}$）为[3]

$$N_{c,ii}=\beta_{ii}\frac{w_i}{V_s}\frac{w_i-1}{2}\frac{1}{V_s}\tag{4.4}$$

所以单位时间单位体积内虚拟颗粒 i 所代表的所有实际颗粒所发生的凝并事件的总次数（单位为 $m^{-3}\cdot s^{-1}$）为

$$N_{c,i}=N_{c,ii}+\sum_{j=1,j\neq i}^{N_f}N_{c,ij}=\beta_{ii}w_i\frac{w_i-1}{2}\frac{1}{V_s^2}+\frac{1}{V_s^2}\sum_{j=1,j\neq i}^{N_f}\beta_{ij}w_iw_j\tag{4.5}$$

由于虚拟颗粒 i 代表了 w_i 个实际颗粒，所以单位时间单位体积内每颗实际颗粒平均发生的凝并事件的次数（单位为 $m^{-3}\cdot s^{-1}$）为

$$C_i=\frac{N_{c,i}}{w_i}=\beta_{ii}\frac{w_i-1}{2}\frac{1}{V_s^2}+\frac{1}{V_s^2}\sum_{j=1,i\neq j}^{N_f}\beta_{ij}w_j\tag{4.6}$$

为了简化起见，可以认为

$$C_i\approx\frac{1}{V_s^2}\sum_{j=1,i\neq j}^{N_f}\beta_{ij}w_j\approx\frac{1}{V_s^2}\sum_{j=1}^{N_f}\beta_{ij}w_j\tag{4.7}$$

由于虚拟颗粒 i 是它所代表的那些实际颗粒的指示器，i 在单位时间单位体积

内发生一次凝并事件的次数就是C_i，也可称为虚拟颗粒i发生凝并事件的总概率。

所以虚拟颗粒i只发生一次凝并事件的时间尺度（虚拟颗粒i的凝并时间尺度，单位为 s）为

$$t_{i,\mathrm{coag}} = \frac{1}{V_\mathrm{s} C_i} \tag{4.8}$$

2）虚拟颗粒i的破碎时间尺度

破碎、冷凝/蒸发、沉积等事件均可归纳为单颗粒事件，它们只涉及一颗已存在的颗粒。根据破碎核的定义，虚拟颗粒i的破碎时间尺度（单位为 s）为

$$t_{i,\mathrm{brk}} = \frac{1}{S_i} \tag{4.9}$$

式中：S_i为虚拟颗粒i的破碎核。

3）虚拟颗粒i的沉积时间尺度

同样根据沉积核的定义，虚拟颗粒i只发生一次沉积事件的时间尺度（单位为 s）为

$$t_{i,\mathrm{depo}} = \frac{1}{R_i} \tag{4.10}$$

式中：R_i为虚拟颗粒i的沉积核。

4）虚拟颗粒i的冷凝/蒸发时间尺度

在不同的领域存在不同的冷凝/蒸发事件描述方式，即连续型冷凝/蒸发核和离散型冷凝/蒸发核。在连续形式下，冷凝/蒸发事件导致颗粒尺度分布的时间演变过程采用如下形式的 GDE 描述：

$$\frac{\partial n(v,t)}{\partial t} = \frac{-\partial[I(v,t)n(v,t)]}{\partial v} \tag{4.11}$$

式中：$I(v,t)$为尺度为v的颗粒的连续型冷凝/蒸发核，表示t时刻、体积为v的颗粒的体积变化率（$\mathrm{m^3/s}$），$I(v)=\mathrm{d}v/\mathrm{d}t$。此时可认为在$\Delta t$内任何一颗颗粒均必将发生冷凝/蒸发事件。如果采用连续形式描述冷凝/蒸发时，对于冷凝/蒸发事件与其他动力学事件同时发生的工况，通常并不需要考虑某颗虚拟颗粒i发生一次冷凝/蒸发事件的时间尺度$t_{i,\mathrm{cond}}$，时间步长的计算依据其他动力学事件的最小时间尺度即可；对于仅仅只有冷凝/蒸发事件发生的工况，可以计算某虚拟颗粒i在当前稳定的冷凝/蒸发速率下生长或消融的时间长度，因此发生一次冷凝/蒸发事件的时间尺度（单位为 s）$t_{i,\mathrm{cond}}=v_i/I_i$，这里$I_i$为虚拟颗粒$i$的连续型冷凝/蒸发核。

在离散形式下，冷凝/蒸发事件对颗粒尺度分布的时间变化率如下：

$$\frac{\partial n(v,t)}{\partial t} = C_\mathrm{sur} D_\mathrm{sur}(v-v_0,t)n(v-v_0,t) - C_\mathrm{sur} D_\mathrm{sur}(v,t)n(v,t) \tag{4.12}$$

式中：v_0 为冷凝/蒸发组分的气相单体的体积；C_{sur} 为冷凝单体的数目浓度（m^{-3}）；$D_{\text{sur}}(v,t)$ 为时刻 t、尺度为 v 的颗粒发生冷凝/蒸发（表面生长/消融）事件的速率常数，可以理解为尺度为 v 的颗粒与冷凝单体发生凝并事件的速率，即尺度为 v 的颗粒与冷凝单体的凝并核（m^3/s）。此时认为冷凝/蒸发事件的发生是由于冷凝/蒸发组分的气相单体与某颗颗粒发生凝并的缘故。所以发生一次冷凝/蒸发事件的时间长度 $t_{i,\text{cond}}$（单位为 s）为

$$t_{i,\text{cond}} = \frac{1}{C_{\text{sur}} D_{\text{sur},i}} \tag{4.13}$$

5）成核时间尺度

成核事件属于零颗粒事件，即该事件的发生与系统中已存在的任何颗粒均无关，而主要取决于已存在的气相前驱体（Precursor）微团颗粒，这与凝并、破碎、沉积和冷凝/蒸发等双颗粒或单颗粒事件不同。成核事件的结果是新生成若干颗核体颗粒。发生一次成核事件的时间尺度（单位为 s）如下计算：

$$t_{\text{nucl}} = \frac{1}{J(v,t)\delta(v_{\min},v)V_{\text{s}}^2} \tag{4.14}$$

式中：$J(v,t)$ 为成核核，表示 t 时刻产生尺度为 v 的核体的速率（$\text{s}^{-1}\cdot\text{m}^{-6}$）；$\delta(v_{\min},v)$ 为 Dirac delta 函数，$J(v,t)\delta(v_{\min},v)$ 表示成核产生的核体（nuclei）的体积为 $v_{\min}$。每发生一次成核事件均将对前驱体的数目浓度产生影响，因此成核时间尺度是时间 t 的函数。一般来说，前驱体浓度较大，使得产生一颗核体的时间间隔极短，通常远远小于发生一次其他动力学时间的最小时间尺度，如果令时间步长等于成核时间尺度，则系统演变的初始阶段时间窗口将以非常小的间隔被离散，这会使得程序的计算代价极大。因此，在数值模拟中，对于成核事件与其他动力学事件同时发生的工况，时间步长取决于其他动力学事件的最小时间尺度；对于单独发生的成核事件，可以假设一个时间段内同时产生了 N_{n} 颗核体颗粒，这些核体颗粒的产生速率依赖于前一时间步长末端的前驱体数目浓度，故此时产生 N_{n} 颗核体颗粒的时间段长度为 $t_{N_{\text{n}},\text{nucl}} = N_{\text{n}}/[J(v,t)\delta(v_{\min},v)V_{\text{s}}^2]$，此时可以把该时间长度 $t_{N_{\text{n}},\text{nucl}}$ 作为时间步长。

6）时间步长的设置

因此，在时间驱动 MC 方法中，时间步长必须小于等于任何一颗虚拟颗粒发生任何一次动力学事件的最小时间尺度，即

$$\Delta t \leqslant \min\left\{\begin{matrix}\dfrac{1}{\max\limits_{i=1,\cdots,N_{\text{f}}}(V_{\text{s}}C_i)}, \dfrac{1}{\max\limits_{i=1,\cdots,N_{\text{f}}}(S_i)}, \dfrac{1}{\max\limits_{i=1,\cdots,N_{\text{f}}}(R_i)}, \\ \left[\min\limits_{i=1,\cdots,N_{\text{f}}} \dfrac{v_i}{I_i} \middle\| \dfrac{1}{\max\limits_{i=1,\cdots,N_{\text{f}}}(C_0 D_{\text{sur},i})}\right], \dfrac{1}{J(v,t)\delta(v_{\min},v)V_{\text{s}}^2}\end{matrix}\right\} \tag{4.15}$$

式中："$a \parallel b$"代表在连续形式的冷凝/蒸发时间尺度 a 和离散形式的冷凝/蒸发时间尺度 b 中两者选一。

一般来说，为了增加 MC 循环的次数以增加计算精度，Δt 如下设置：

$$\Delta t = \alpha \times \min\left\{\begin{matrix} \dfrac{1}{\max\limits_{i=1,\cdots,N_f}(V_s C_i)}, \dfrac{1}{\max\limits_{i=1,\cdots,N_f}(S_i)}, \dfrac{1}{\max\limits_{i=1,\cdots,N_f}(R_i)}, \\ \left[\min\limits_{i=1,\cdots,N_f}\dfrac{v_i}{I_i} \middle\| \dfrac{1}{\max\limits_{i=1,\cdots,N_f}(C_0 D_{\mathrm{sur},i})}\right], \dfrac{1}{J(v,t)\delta(v_{\min},v)V_s^2} \end{matrix}\right\} \tag{4.16}$$

式中：α 为乘积因子，一般 $\alpha \leqslant 0.01$。

值得注意的是，各种动力学事件的发生导致 PSDF 随时间变化，前驱体数目浓度和冷凝单体数目浓度也会随时间变化，这会使得各种事件的时间尺度发生改变，故在进行每一次虚拟颗粒整体循环之前，都需要重新计算 Δt，如图 4.5 所示。

4.1.6　凝并事件的处理

对凝并事件的处理包括当前跟踪的虚拟颗粒是否发生凝并事件的判断、凝并伙伴的选择、该次凝并事件的后果处理。

1) 凝并是否发生的判断

认为颗粒凝并所导致的动力学演变过程为 Markov 过程[1]，此时，对于虚拟颗粒 i，其在 Δt 内发生凝并事件的概率 $Pr_{\mathrm{coag},i}(\Delta t)$ 满足指数分布[4]，即 $Pr_{\mathrm{coag},i}(\Delta t)=1-\exp(-V_s C_i \Delta t)\approx V_s C_i \Delta t$。这里利用 Nanbu 算法[5]来考虑颗粒是否凝并以及寻找其凝并伙伴，如图 4.6 所示。首先生成满足均匀分布、位于[0,1]的随机数 r_1，则在某个时间步长 Δt 内，对于当前跟踪的虚拟颗粒 i，其发生凝并事件的总概率为乘积($V_s C_i \Delta t$)，如果随机数 r_1 小于等于($V_s C_i \Delta t$)，那么虚拟颗粒 i 将确定要发生一次凝并事件。

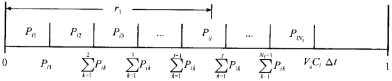


图 4.6　Nanbu 算法示意图

2) 凝并伙伴的选择

如果确定虚拟颗粒 i 将发生凝并事件，则继续利用 Nanbu 算法[5,6]来寻找凝并伙伴。首先计算当前 Δt 内、跟踪颗粒 i 与不同于 i 的某颗虚拟颗粒 j 发生凝并的概率 $P_{ij}=w_j\beta_{ij}\Delta t/V_s$。可见，

$$V_{\mathrm{s}}C_i\Delta t = \frac{\Delta t \sum_{j=1}^{N_{\mathrm{f}}} (\beta_{ij} w_j)}{V_{\mathrm{s}}} = \sum_{k=1}^{N_{\mathrm{f}}} P_{ik} \tag{4.17}$$

然后仍然通过随机数 r_1 来判断与虚拟颗粒 i 发生凝并的伙伴颗粒 j，如果以下关系得到满足，则认为虚拟颗粒 j 为 i 的凝并伙伴：

$$\sum_{k=1}^{j-1} P_{ik} \leqslant r_1 \leqslant \sum_{k=1}^{j} P_{ik}, \quad j \in [1, N_{\mathrm{f}}] \tag{4.18}$$

3）凝并事件的后果处理

对凝并后果的处理的一项重要内容是保持虚拟颗粒数目恒定以保持稳定的计算精度，对凝并事件后果的处理集中体现了 MMC 算法常体积和常数目的思想，MMC 算法通过调整发生凝并的虚拟颗粒的数目权值 w 来实现。

当前跟踪的虚拟颗粒 i（数目权值为 w_i，体积为 v_i）与它的凝并伙伴 j（数目权值为 w_j，体积为 v_j）之间发生的二元凝并事件，相当于 i 所代表的某些实际颗粒与 j 代表的某些实际颗粒发生了二元凝并事件。由于两颗实际颗粒 A 和 B（体积分别为 v_{A} 和 v_{B}）的凝并结果是一颗新的体积为（$v_{\mathrm{A}}+v_{\mathrm{B}}$）的实际颗粒，所以不管虚拟颗粒 i 和 j 凝并过程中实际颗粒间具体的凝并配对过程，总的凝并后果是 i 和 j 所代表的旧的实际颗粒被新的体积为（v_i+v_j）的实际颗粒所取代，并且新的实际颗粒数目较原有实际颗粒数目总和减少了一半，即（w_i+w_j）/2。为了保持虚拟颗粒总数目，并不舍弃虚拟颗粒 A 和 B 中的任何一颗，而是通过调整两颗虚拟颗粒的数目权值和体积来体现凝并后果。可以认为虚拟颗粒 i 和 j 的数目权值均各自减少了一半，并且其体积均变为（v_i+v_j）。图 4.7 示意了 MMC 算法对两虚拟颗粒之间凝并事件的后果处理。值得注意的是，虚拟颗粒的数目权值并不要求一定是整数，但是为了作图方便，图 4.7 中两虚拟颗粒的数目权值均为整数。由于每颗虚拟颗粒均需要判断其是否凝并和寻找其凝并伙伴，所以同一凝并事件将被检测到两次。如果当前跟踪的虚拟颗粒为 i，则只处理虚拟颗粒 i 以体现凝并事件的后果，而不对当前的凝并伙伴 j 作任何改变，即

$$\begin{aligned} &(w_i)_{\mathrm{new}} = \frac{1}{2}(w_i)_{\mathrm{old}}, \quad (v_i)_{\mathrm{new}} = (v_i)_{\mathrm{old}} + (v_j)_{\mathrm{old}} \\ &(w_j)_{\mathrm{new}} = (w_j)_{\mathrm{old}}, \quad (v_j)_{\mathrm{new}} = (v_j)_{\mathrm{old}} \end{aligned} \tag{4.19}$$

如果当前跟踪颗粒轮到虚拟颗粒 j 的时候，理论上会检测到同一凝并事件，且其凝并伙伴为虚拟颗粒 i，同样仅仅改变当前跟踪的虚拟颗粒 j 的数目权值和体积以体现凝并事件的后果，即

$$\begin{aligned} &(w_j)_{\mathrm{new}} = \frac{1}{2}(w_j)_{\mathrm{old}}, \quad (v_j)_{\mathrm{new}} = (v_i)_{\mathrm{old}} + (v_j)_{\mathrm{old}} \\ &(w_i)_{\mathrm{new}} = (w_i)_{\mathrm{old}}, \quad (v_i)_{\mathrm{new}} = (v_i)_{\mathrm{old}} \end{aligned} \tag{4.20}$$

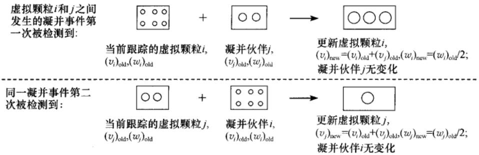


图 4.7 虚拟颗粒凝并事件的后果处理示意图

这样不仅保持了整体虚拟颗粒数目的不变，而且不需要调整计算区域的体积。

严格来说，只有$(w_i)_{\text{old}}=(w_j)_{\text{old}}$或者$(v_i)_{\text{old}}=(v_j)_{\text{old}}$时，以上对凝并事件后果的处理方案才能保证凝并前后颗粒总体积不变，即

$$
\begin{aligned}
&(v_i)_{\text{new}}(w_i)_{\text{new}}+(v_j)_{\text{new}}(w_j)_{\text{new}}\\
&=\frac{1}{2}\times[(v_i)_{\text{old}}+(v_j)_{\text{old}}](w_i)_{\text{old}}+\frac{1}{2}\times[(v_i)_{\text{old}}+(v_j)_{\text{old}}](w_j)_{\text{old}}\\
&=\frac{1}{2}\times[(v_i)_{\text{old}}+(v_j)_{\text{old}}][(w_i)_{\text{old}}+(w_j)_{\text{old}}]\\
&=\begin{cases}(v_i)_{\text{old}}[(w_i)_{\text{old}}+(w_j)_{\text{old}}]=(v_i)_{\text{old}}(w_i)_{\text{old}}+(v_j)_{\text{old}}(w_j)_{\text{old}}, \\ \qquad \text{当}(v_i)_{\text{old}}=(v_j)_{\text{old}}\text{时} \\ [(v_i)_{\text{old}}+(v_j)_{\text{old}}](w_i)_{\text{old}}=(v_i)_{\text{old}}(w_i)_{\text{old}}+(v_j)_{\text{old}}(w_j)_{\text{old}}, \\ \qquad \text{当}(w_i)_{\text{old}}=(w_j)_{\text{old}}\text{时}\end{cases}
\end{aligned}
\tag{4.21}
$$

显然绝大多数凝并工况不可能满足这个条件，所以 MMC 算法的这种处理方式存在一定的数值误差，这是为了同时保持常体积和常数目所付出的代价。如果参与凝并事件的两虚拟颗粒的数目权值和尺度之间的差异较小，通过多次 MC 循环并取平均值的办法可以有效抑制这种误差的传播和繁殖。

4.1.7 破碎事件的处理

破碎、冷凝/蒸发、沉积等事件只涉及一颗主颗粒，同样可以认为这些事件的发生满足标准的 Markov 过程，即虚拟颗粒 i 在 Δt 内发生某个事件的概率满足指数分布。破碎事件的处理包括跟踪颗粒是否发生破碎的判断以及破碎产生的子颗粒的处理。

1）破碎是否发生的判断

虚拟颗粒 i 在 Δt 内发生破碎的概率 $Pr_{\text{brk},i}(\Delta t)=1-\exp(-S_i\Delta t)\approx S_i\Delta t$，所以，在一个标准的 MC 模拟过程中，确定虚拟颗粒 i 发生破碎事件的判断表达式如下：

$$r \leqslant 1-\exp(-S_i\Delta t) \approx S_i\Delta t \tag{4.22}$$

2) 破碎事件的后果处理

破碎产生的子颗粒采用子颗粒尺度分布函数来描述。γ_{ij}为颗粒i因破碎而产生颗粒j的概率;b_i为颗粒i破碎产生的子颗粒的数目;它们满足如下规则[6~8]:

(1) $\sum_j \gamma_{ij}=1$,表示母颗粒i破碎产生某子颗粒的概率总和为1。

(2) $b_i \geqslant 2$,表示子颗粒数目至少等于2。

(3) $\sum_j (v_j\gamma_{ij}b_i)=v_i$,表示所有子颗粒的体积总和仍然等于母颗粒的体积$v_i$,这实际上是破碎前后质量守恒原则。

对于虚拟颗粒i的破碎事件,首先根据b_i得到子颗粒数目,此时需要b_i颗新的虚拟颗粒来分别代表这b_i颗子颗粒,这些子颗粒的数目权值均继承了母颗粒i的数目权值w_i,然后通过γ_{ij}确定b_i颗子颗粒的尺度,并确保破碎前后质量守恒,即$v_i=\sum_k v_k$。把第一颗子颗粒取代母颗粒i的位置,并把剩下的b_i-1颗新生的子颗粒加入已有的虚拟颗粒数列。注意到,随着一次破碎事件的进行,虚拟颗粒总数目将增加b_i-1,如果在下一个时间步长内跟踪所有虚拟颗粒的话,将使得计算代价不断增大。对破碎后果的处理的一项重要内容是保持虚拟颗粒数目恒定。此时采用如下步骤来实现常数目:对于b_i-1个子颗粒中的某一颗子颗粒l,其尺度为v_l,其数目权值为w_l,在已有的虚拟颗粒数列中寻找与子颗粒l尺度相同或最接近的一颗虚拟颗粒m,如果存在多颗与子颗粒l尺度相同或最接近的虚拟颗粒,则通过一个随机过程选择一颗虚拟颗粒;然后把子颗粒l与虚拟颗粒m进行合并,即虚拟颗粒m的数目权值更新为其原有数目权值与子颗粒l数目权值之和。下面以二元破碎为例来说明 MMC 算法对破碎事件的后果处理。

对于虚拟颗粒i的二元破碎而言,子颗粒数目为2,首先分别以虚拟颗粒j和虚拟颗粒k来代表这两颗子颗粒,其数目权值分别为w_j和w_k,尺度分别为v_j和v_k,此时存在如下关系:

$$(w_i)_{\rm old}=w_j=w_k, \quad (v_i)_{\rm old}=v_j+v_k \tag{4.23}$$

如果通过γ_{ij}确定了其中一颗子颗粒j的尺度v_j,则另外一颗子颗粒k的尺度v_k就能通过式(4.23)得到。

为了保持恒定的虚拟颗粒总数目,首先把其中的一颗子颗粒j来取代母颗粒i在虚拟颗粒序列中的位置,即

$$(v_i)_{\rm new}=v_j, \quad (w_i)_{\rm new}=w_j=(w_i)_{\rm old} \tag{4.24}$$

然后,另外一颗子颗粒k与虚拟颗粒数列中的某一颗虚拟颗粒m合并,该虚拟颗粒m与子颗粒k有着相同或者相近的尺度,是与虚拟颗粒k同属于一类颗粒中的任何一颗虚拟颗粒(通过随机数来选取)。合并过程中保持质量守恒原则,

如下：

$$(v_m)_{\text{new}} = (v_m)_{\text{old}}, \quad (w_m)_{\text{new}} = (w_m)_{\text{old}} + w_k = (w_m)_{\text{old}} + (w_i)_{\text{old}} \tag{4.25}$$

这样可以保持破碎之后虚拟颗粒数目仍然保持不变。

4.1.8 冷凝/蒸发(表面生长/消融)事件的处理

1）连续形式冷凝/蒸发核工况

在连续形式冷凝/蒸发核工况中，认为每个时间步长范围内该事件无论如何都对任何一颗颗粒发生影响，其影响就是导致颗粒的体积发生变化，但是对颗粒的数目浓度没有影响。故只需要在 Δt 范围内处理每颗颗粒的体积变化值即可。在 Δt 内某颗虚拟颗粒 i 由于冷凝/蒸发而导致的体积变化值 $\Delta v_i = I_i \Delta t$，所以颗粒 i 发生冷凝/蒸发事件后的体积 $(v_i)_{\text{new}} = (v_i)_{\text{old}} + I_i \Delta t$，而虚拟颗粒 i 的数目权值不变。

2）离散形式冷凝/蒸发核工况

此时冷凝事件的发生被视为气相的冷凝单体与已存在的颗粒发生碰撞凝并。此时需要判断某颗颗粒是否发生冷凝/蒸发事件，并对该事件进行后果处理。

虚拟颗粒 i 在 Δt 内发生冷凝事件的概率为 $Pr_{\text{cond},i}(\Delta t) = 1 - \exp(-C_{\text{sur}} D_{\text{sur}i} \Delta t) \approx C_{\text{sur}} D_{\text{sur}i} \Delta t$，$D_{\text{sur}i}$ 为虚拟颗粒 i 的冷凝速度，C_{sur} 为冷凝单体的数目浓度。如果随机数 r 小于等于 $Pr_{\text{cond},i}(\Delta t)$，则认为虚拟颗粒 i 发生一次冷凝事件，事件之后虚拟颗粒 i 的数目权值不变，尺度为 $(v_i)_{\text{new}} = (v_i)_{\text{old}} + v_0$，$v_0$ 为冷凝单体的体积，同时冷凝单体的数目浓度也相应发生变化，$(C_{\text{sur}})_{\text{new}} = [(C_{\text{sur}})_{\text{old}} V_s - k]/V_s$，$k$ 为 Δt 内所有冷凝事件的数目。由于冷凝单体的数目浓度通常具有较大的数量级，为简单起见，通常可近似认为其是恒定的。

4.1.9 沉积事件的处理

MMC 算法对沉积事件的处理包括颗粒是否沉积的判断以及沉积后果的处理。

1）沉积事件是否发生的判断

同样认为颗粒沉积事件的发生为 Markov 过程，虚拟颗粒 i 在 Δt 内发生沉积事件的概率 $Pr_{\text{depo},i}(\Delta t) = 1 - \exp(-R_i \Delta t) \approx R_i \Delta t$，所以，在一个标准的 MC 模拟过程中，确定虚拟颗粒 i 发生沉积事件的判断表达式如下：

$$r \leqslant 1 - \exp(-R_i \Delta t) \approx R_i \Delta t \tag{4.26}$$

否则，认为虚拟颗粒 i 不会发生沉积事件，将在下一个时间步长内继续跟踪它。

2）沉积事件的后果处理

颗粒沉积的直接后果是实际颗粒总数目的减少，如果不进行处理，虚拟颗粒数目也会相应减少。假设虚拟颗粒 i 确定将要沉积下来，则首先通过一个随机过程

从虚拟颗粒数列中随机选取一颗虚拟颗粒 $j, j\neq i$。此时，把虚拟颗粒 j（数目权值为 w_j，体积为 v_j）分裂成两颗虚拟颗粒 k（数目权值为 w_k，体积为 v_k）和 l（数目权值为 w_l，体积为 v_l），$w_j=2w_k=2w_l$，且 $v_j=v_k=v_l$；然后把虚拟颗粒 k 和 l 分别取代虚拟颗粒 i 和 j，即

$$\begin{aligned}(v_i)_{\text{new}} &= v_k = (v_j)_{\text{old}}, \quad (w_i)_{\text{new}} = w_k = \frac{1}{2}(w_j)_{\text{old}} \\ (v_j)_{\text{new}} &= v_l = (v_j)_{\text{old}}, \quad (w_j)_{\text{new}} = w_l = \frac{1}{2}(w_j)_{\text{old}}\end{aligned} \tag{4.27}$$

这些处理手段实际上相当于用一个随机选择的虚拟颗粒的一半来填补确定沉积的虚拟颗粒留下的空白，这样的处理手段保持了虚拟颗粒总数目不变，也符合颗粒沉积实际过程。

4.1.10　成核事件的处理

核体产生的速率一般取决于前驱体的数目浓度，一般认为核体的产生速率与前驱体的数目浓度 $C_{\text{pre}}(t)$ 成一阶正比[9]，即

$$V_s J(v,t)\delta(v_{\min},v) = K_{\text{nucl}} C_{\text{pre}}(t) = -\frac{\mathrm{d}C_{\text{pre}}(t)}{\mathrm{d}t}$$

式中：K_{nucl} 为成核速率（s^{-1}）；$C_{\text{pre}}(t)$ 为前驱体的数目浓度（m^{-3}）。

于是

$$C_{\text{pre}}(t) = C_{\text{pre}}(0)\exp(-K_{\text{nucl}}t)$$

故

$$V_s J(v,t)\delta(v_{\min},v) = K_{\text{nucl}} C_{\text{pre}}(0)\exp(-K_{\text{nucl}}t)$$

所以 Δt 时间内通过成核事件产生的实际颗粒数目浓度为

$$C_{\text{nucl}} = \Delta t K_{\text{nucl}} C_{\text{pre}}(0)\exp(-K_{\text{nucl}}t)$$

利用一个新生的虚拟颗粒 i 来代表这些新产生的成核体，虚拟颗粒 i 的尺度为 $v_i=v_{\text{nucl}}=v_{\min}$，数目权值为 $w_i=C_{\text{nucl}}V_s$。

此时虚拟颗粒总数目将增加一个，这将增加 MC 的计算代价，特别是时间演变较长的情形下，为了保持虚拟颗粒数目，采用与破碎事件类似的处理方法，随机寻找一个已经存在的虚拟颗粒 j，该虚拟颗粒 j 的体积等于或者最接近于核体体积 $v_{\min}$，把虚拟颗粒 i 和 j 合并为一个虚拟颗粒，并把该虚拟颗粒取代原来的虚拟颗粒 j，即

$$\begin{aligned}(v_j)_{\text{new}} &= v_i = v_{\min} \\ (w_j)_{\text{new}} &= (w_j)_{\text{old}} + w_i = (w_j)_{\text{old}} + \Delta t V_s K_{\text{nucl}} C_{\text{pre}}(0)\exp(-K_{\text{nucl}}t)\end{aligned} \tag{4.28}$$

这样可保持虚拟颗粒总数目不变。

4.2 多重 Monte Carlo 算法的验证

鉴于 MMC 算法所描述问题的复杂性,对于 MMC 算法进行严格地验证也是一个复杂和艰巨的工作。要证明新发展的 MMC 算法具有较为先进的性能,必须进行如下工作:①MMC 算法是否能够准确描述初始单分散性颗粒群或初始多分散性颗粒群的动力学演变过程?②MMC 算法是否能够准确描述任何单独发生的动力学事件?③MMC 算法能否准确描述几个同时发生的动力学事件?④MMC 算法与其他主流 MC 方法相比较性能如何?

因为求解通用动力学方程(GDE)的各种数值方法均或多或少存在一些数值误差,难以令人信服地作为一种标准算法来与 MMC 算法进行比较。幸运的是,某些特殊工况下 GDE 存在理论分析解。因此把 MMC 算法数值模拟结果与这些相应的理论分析解进行比较是检验其计算精度的最佳方法。本节的任务就是检验 MMC 算法在各种复杂工况中对于各种单独发生的或者组合发生的动力学事件的描述精度。由于颗粒群平衡方程的求解难点主要在于双颗粒事件(对于零维 PBM 而言,为凝并事件),另外,单颗粒事件破碎将产生多个子颗粒,处理起来也较为困难,所以本章主要针对纯凝并、纯破碎以及同时发生的凝并和破碎事件对 MMC 算法进行验证,MMC 算法描述其他事件如纯冷凝[10,11]、纯沉积[12~14]、纯成核、同时发生的凝并和冷凝[10,11,15]、同时发生的凝并和沉积[16,17]、同时发生的凝并和成核[18]可以参照文献[19]。

4.2.1 纯凝并工况

1) Case1,常凝并核工况,初始单分散性颗粒群,$\beta(u,v)=A$

其中 u、v 分别为发生凝并的两颗颗粒的体积,A 为常数,表示凝并速率与颗粒尺度分布无关,它可视为布朗凝并的一种极端情形。初始颗粒的数目浓度为 N_0,定义特征凝并时间尺度 $\tau_{\mathrm{coag}}=1/(N_0A)$。$t$ 时刻颗粒总数目浓度、平均质量($v_{\mathrm{avg}}(t)$或$\langle v\rangle$)、标准偏差($\sigma_{\mathrm{g}}=\langle v^2\rangle/\langle v\rangle^2$)理论解参照文献[20]。

对于本工况[21,22],以单位体积为计算区域,设置初始颗粒数目 $N_0=10^8$,单分散性颗粒的初始体积 v_0 为 1(无量纲),凝并核常数 $A=10^{-9}$,虚拟颗粒数目 $N_{\mathrm{f}}=3000$,MMC 算法对几个关键参数随时间变化的模拟结果与相应的理论分析解的比较如图 4.8(a)所示,这些关键参数包括颗粒数目与初始颗粒数目的比值[$N(t)/N_0$]、颗粒平均质量与初始颗粒平均质量的比值[$v_{\mathrm{avg}}(t)/v_0$]、颗粒平均质量的标准偏差[$\sigma_{\mathrm{g}}(t)$],其模拟结果与理论值均符合非常好,即使随着凝并事件的不断进行,随着演变时间的不断延长,实际颗粒数目大大减少,仍然能够保证极好

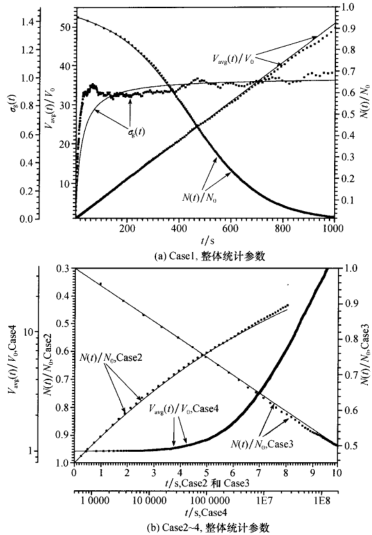


图 4.8 初始单分散性颗粒群的典型凝并工况

—— 理论分析解； · MMC 算法解

的计算精度。

2）Case2，线性凝并核工况，初始单分散性颗粒群，$\beta(u,v)=A(u+v)$

这种工况[21,22]表示两颗颗粒的凝并概率正比于两颗颗粒的体积总和，通常可用于近似描叙湍流重力机制作用下的颗粒凝并行为。颗粒总数目浓度的理论解参照文献[20]。在数值模拟中，初始条件同 Case1，虚拟颗粒数目为 2000。

3）Case3，二次方凝并核工况，初始单分散性颗粒群，$\beta(u,v)=Auv$

这种工况[21,22]表示两颗颗粒的凝并概率取决于两颗颗粒体积的乘积，是对凝

结过程中一种临界现象“凝胶化”的描述。仅仅在 $t<1/(N_0A)$ 时才存在颗粒总数目浓度理论解，参照文献[20]。在数值模拟中，初始条件同 Case1，虚拟颗粒数目为 1000。

4) Case4，连续区布朗凝并核，初始单分散性颗粒群

当颗粒粒径足够小($Kn<0.01$)以至于颗粒处于连续区时，由于颗粒的布朗扩散而导致的凝并核为[23]

$$\beta(u,v)=\frac{2k_BT}{3\mu}\left[2+\left(\frac{u}{v}\right)^{\frac{1}{3}}+\left(\frac{v}{u}\right)^{\frac{1}{3}}\right]=\frac{2k_BT}{3\mu}(u^{\frac{1}{3}}+v^{\frac{1}{3}})(u^{-\frac{1}{3}}+v^{-\frac{1}{3}}) \tag{4.29}$$

式中：k_B 为波尔兹曼常数(1.38054×10^{-23}J · K)；T 为温度；μ 为气体(或液体)介质的动力学黏性系数。定义凝并特征时间 $\tau_{coag}=3\mu/(8k_BTN_0)$，则 t 时刻颗粒平均质量理论解参照文献[24]、[25]。在数值模拟中[21,22]，温度 $T=2500$K，模拟过程中温度认为不变，介质动力黏性系数 $\mu=1.83\times10^{-5}$kg/(m · s)，$N_0=10^8$，$N_f=1000$。

图 4.8(b)综合显示了 Case2～4 中相关关键参数的数值模拟结果与理论解的比较。其中包括线性凝并核的 Case2 和二次方凝并核的 Case3 中颗粒数目与初始颗粒数目的比值$[N(t)/N_0]$随时间变化曲线、单分散性颗粒的连续区布朗凝并核的 Case4 中颗粒平均质量与初始颗粒平均质量$[v_{avg}(t)/v_0]$随时间变化曲线。MMC 模拟值与理论值符合甚好，以至于 Case4 中两条曲线几乎完全重叠在一起而难以区分开来。

5) Case5，常凝并核，初始指数分布的多分散性颗粒群，$\beta(u,v)=A$

初始时刻颗粒尺度分布满足指数分布：

$$n(v,0)=\frac{N_0}{v_{g0}}\exp\left(-\frac{v}{v_{g0}}\right) \tag{4.30}$$

式中：N_0 为初始颗粒数目浓度；v_{g0} 为此时颗粒平均尺度。

Case6～7 中初始时刻多分散性颗粒群的尺度谱也采用指数函数描述，在这三种工况中，$v_{g0}=0.029\mu\text{m}^3$，$N_0=10^6\text{cm}^{-3}$。Case5 中颗粒尺度分布函数的理论分析解参照文献[26]、[27]。凝并特征时间尺度定义为 $\tau_{coag}=2/(AN_0)$。在数值模拟中[10,28]，$A=6.405\times10^{-10}\text{cm}^3/\text{s}$，虚拟颗粒数目为 3000，离散系统动力学演变的时间长度指定为 $\tau_{coag}/2\approx1561.3$s。

6) Case6，线性凝并核，初始指数分布的多分散性颗粒群，$\beta(u,v)=A(u+v)$

颗粒尺度分布函数随时间演变过程的理论分析解参照文献[26]、[27]。该工况中凝并特征时间尺度 $\tau_{coag}=1/(AN_0v_{g0})$。这里[10,28]取 $A=1.115\times10^{-8}\text{cm}^3/(\mu\text{m}^3\cdot\text{s})$，$N_f=3000$，离散系统动力学演变的时间长度 T_1 指定为 $\tau_{coag}/2\approx$

1561.3s。

7) Case7，二次方凝并核，初始指数分布的多分散性颗粒群，$\beta(u,v)=Auv$

颗粒尺度分布函数的理论分析解参照文献[27]。类似地，定义 $\tau_{coag}=1/(AN_0 v_{g0}{}^2)$，且取[10,28] $A=3.808\times10^{-7}\text{cm}^3/(\mu\text{m}^6\cdot\text{s})$，$\tau_{coag}=3122.6$，$N_f=3000$，$T_1=\tau_{coag}/2\approx1561.3\text{s}$。

对于初始多分散性颗粒群的 Case5～7，为了生成离散的虚拟颗粒群以代表实际颗粒群，需要对满足指数函数连续分布形式的颗粒尺度谱进行离散。这里限定初始时刻颗粒尺度谱范围为 0～1μm^3，并在最小颗粒尺度到最大颗粒尺度之间按照等分原则把颗粒尺度谱离散为 200 个类。当需要统计特定时刻 PSDF 时，需要统计每类颗粒的数目浓度。但是值得注意的是，对离散系统的动力学演变过程进行 MC 描述时，并不需要任何颗粒分类信息，这可减少离散误差及避免离散误差的扩散[29]。

对于 Case5～7，颗粒尺度分布函数在两个特定时刻($\tau_{coag}/8$ 和 $\tau_{coag}/2$)处的曲线分别如图 4.9 所示。显然，MMC 算法数值模拟结果与相应的理论分析解基本复合较好。不同时刻处的颗粒尺度分布曲线仍然保持指数分布，即颗粒尺度分布的时间演变过程过程满足"自保持(self-preserving)"分布[23,25]。

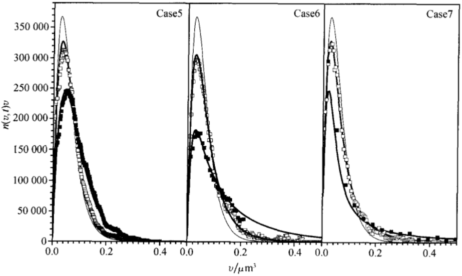


图 4.9　Case5～7，颗粒尺度分布函数的时间演变过程

——初始尺度分布；　━━理论分析解；　□ MMC 算法解($t=\tau_{coag}/8$)；　■ MMC 算法解($t=\tau_{coag}/2$)

8) 计算代价

普通的 MC 方法由于随着凝并过程的进行所模拟的颗粒总数目会减少，所以一般要处理更多的颗粒，对于 Case1～3，相同的计算条件，文献[30]中所模拟的颗

粒数目为 $10^3 \sim 10^5$；对于 Case4，相同的计算条件，文献[24]中所模拟的颗粒数目为 15 000。虽然无法比较这些算法与 MMC 算法的计算代价(因文献[24]、[30]中都无计算代价方面的数据)，但可以基本肯定，MMC 算法由于跟踪较少的虚拟颗粒而大大减少了计算代价。7 种计算工况的计算代价[10,21,22,28]如表 4.1 所示，其中计算环境为 Athlon Xp2500＋，512M，Visual Fortran 6.0，Windows XP professional，而 T_{CPU}表示完成某工况的随机模拟所消耗的 CPU 时间，以此来指代 MMC 算法的计算代价。如无特别说明，本书所有数值模拟均在这种计算环境中完成，在后面不再一一说明。

表 4.1 Case 1～7 的计算代价

工况 / 参数	Case1	Case2	Case3	Case4	Case5	Case6	Case7
N_0	10^8	10^8	10^8	10^8	10^6	10^6	10^6
N_f	3000	2000	1000	1000	3000	3000	3000
T_1/s	1000	8	10	10^8	1561.3	1561.3	1561.3
T_{CPU}/s	1091	763	94	1211	13	131	401

4.2.2 纯破碎工况

仍然选择存在理论分析解的三种特殊工况[19]进行数值模拟，以验证 MMC 算法的计算精度。三种工况分别为常速率的二元破碎、指数速率的二元破碎和指数速率的多元破碎，初始条件如表 4.2 所示。其中 δ 为 Dirac delta 符号。颗粒破碎特征时间尺度定义为 $\tau_{brk}=1/S(v_0)$。初始颗粒群均为单分散性的，初始颗粒尺度 $v_0=1$，初始数目 $N_0=1000$。虚拟颗粒初始数目等于实际颗粒数目，即 1000，而最大数目为 3000。

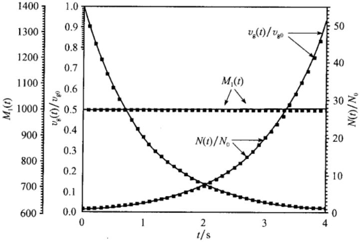
表 4.2 三种特殊破碎工况

工况	$S(v)$	$b(u)$	$\gamma(u,v)$	子颗粒尺度分布	$v_0/\mu m^3$	N_0	N_f	τ_{brk}/s	T_1/s	T_{CPU}/s
Case8	1	2	$1/u$	均匀分布	1	1000	3000	1	$4\tau_{brk}$	8.3
Case9	v^2	2	$\delta(v,u/2)$	等尺度分布	1	1000	3000	1	$4\tau_{brk}$	7.9
Case10	$v^{1.8}$	11	$\delta(v,u/11)$	等尺度分布	1	1000	3000	1	$4\tau_{brk}$	10.2

1) Case8，常速率的二元破碎，子颗粒均匀分布

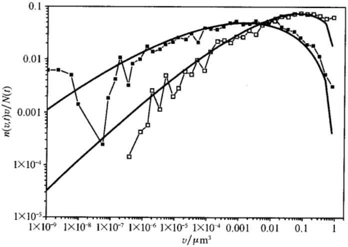
这种工况中子颗粒尺度分布为均匀分布，即子颗粒以相同的概率具有$(0,u)$之间的任何尺度，u 为母颗粒尺度。在这种破碎工况中颗粒尺度谱具有连续性分布。破碎速率为常数，表示与颗粒尺度无关。理论分析解参照文献[31]。

图 4.10(a)为颗粒平均尺度、颗粒总数目、颗粒尺度分布的一阶矩 M_1[$M_1(t) = \int n(v,t)v\mathrm{d}v$，物理意义为颗粒总体积/质量]的理论分析解与 MMC 算法模拟结果的比较，两者符合很好。由图可知，在 $t=4\tau_{\mathrm{brk}}$ 时刻处，实际颗粒总数目已经是初始颗粒数目的 50 多倍，虽然虚拟颗粒数目保持在 3000，一颗虚拟颗粒大约代表 17 颗实际颗粒，但是此时 MMC 算法的模拟结果仍然保持稳定而高的计算精度。



(a) 矩的时间演变

—— 理论分析解；▪ MMC 算法解



(b) 特定时刻颗粒尺度分布

-□- MMC 算法解 (t/τ_{brk}=2.0)；-▪- MMC 算法解 (t/τ_{brk}=3.9)；—— 理论分析解

图 4.10　Case8，颗粒尺度分布的时间演变

在最大尺度和最小尺度之间按照常用对数分类方法划分为 200 个区间来统计颗粒尺度分布的信息，图 4.10(b)为 $t=2.0\tau_{brk}$和 $t=3.9\tau_{brk}$时刻处的颗粒尺度分布函数与理论分析解的比较，横坐标为颗粒尺度 v，纵坐标表示尺度为 v 的颗粒所占总颗粒数的百分比，绝大部分颗粒的尺度在 $10^{-4}\mu m^3$ 之上，这些尺度的颗粒分布曲线与理论分析解符合很好，数目极少的、尺度较小的那部分颗粒的尺度分布曲线与理论分析解定性符合，误差是可以接受且无关大局的。注意到，随着时间的演变，尺度较大的颗粒所占比例越来越小，代之由于破碎而产生的尺度较小的颗粒，但是整个颗粒尺度分布曲线的基本形状保持不变，这是因为颗粒破碎速率和颗粒破碎核均为各向同性的[32]，颗粒尺度分布曲线渐渐达到所谓的“自相似”(self-similar)或“自保持”(self-preserving)分布[33]。

2) Case9，指数速率的二元破碎，子颗粒等尺度分布

这种工况中子颗粒的尺度是相等的，颗粒尺度谱离散分布，颗粒尺度只可能为 $v_0, v_0/2, v_0/4, \cdots, v_0/b(u)^i$（$i$ 为大于等于零的整数）。破碎速率满足指数法则，即认为破碎速率与颗粒尺度的某阶指数成正比。理论分析解参照文献[32]。

Case9 中颗粒平均尺度、颗粒总数目、一阶矩 M_1 的时间演变如图 4.11(a)所示。图 4.11(b)为 $t=2.0\tau_{brk}$和 $t=3.9\tau_{brk}$时刻处的颗粒尺度分布曲线，模拟结果与理论分析解符合很好。在本工况中，在最大尺度和最小尺度之间分别按照以 2 为底的对数分类方法划分为 1000 个区间来统计颗粒尺度分布的信息(其中 2 取自子颗粒数目)。注意到，由于颗粒破碎速率与颗粒尺度相关，导致那些尺度较小的颗粒较难发生破碎，所以相比较于 Case8，颗粒总数目增长较为缓和。同样的，颗粒尺度分布逐渐达到“自相似”状态。需要指出的是，由于虚拟颗粒数目的限制，那些数目较少的(所占比例小于 10^{-3})、尺度较小的颗粒难以被虚拟颗粒所代表，所以颗粒尺度分区曲线[见图 4.11(b)]中 MMC 算法的数值解只有几个离散点，但是这些数值解仍然与理论分析解符合很好。

3) Case10，指数速率的十一元破碎，子颗粒等尺度分布

Case10 类似于 Case9，不同点在于破碎速率的指数阶和子颗粒数目，这个工况是为了检验 MMC 算法对于多元破碎的适应性，理论分析解参照文献[32]。在最大尺度和最小尺度之间按照以 11(11 取自该破碎工况的子颗粒数目)为底的对数分类方法划分为 1000 个区间来统计颗粒尺度分布的信息。颗粒尺度分布的各种整体方面的信息和特定时刻的信息均与理论解符合很好(见图 4.12)。由于是十一元破碎，相比较于 Case9，实际颗粒数目急剧增长，此时 MMC 算法仍然能够很好地描述颗粒尺度分布的时间演变过程。此时颗粒尺度分布曲线也渐趋于“自相似”分布。

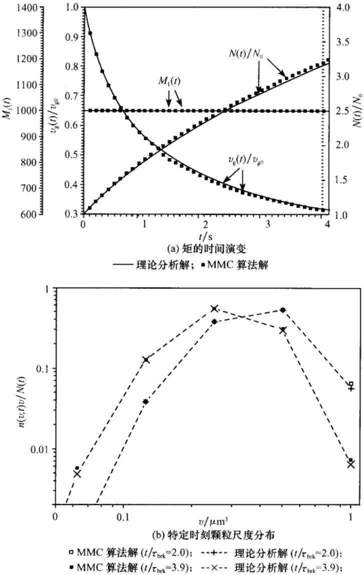


图 4.11　Case9，颗粒尺度分布的时间演变

4.2.3　同时发生的凝并和破碎

就数值方法的实现而言，凝并和破碎是最难处理的两个动力学事件，因为凝并事件涉及两颗已存在的颗粒，而破碎事件则产生多颗颗粒，所以对于同时发生的凝并和破碎的描述则更为复杂。为了验证同时考虑凝并和破碎的 MMC 算

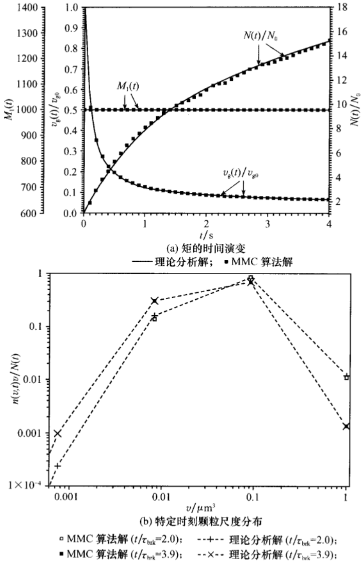


图 4.12　Case10，颗粒尺度分布的时间演变

法，对存在理论分析解的四种特殊工况进行数值模拟，所有工况均为二元凝并和二元破碎，Case11～13 中颗粒初始分布为单分散性颗粒，颗粒初始体积均为 $v_0=1$（无量纲），初始颗粒数目为 $N_0=10^7$（无量纲）；Case14 中初始颗粒尺度谱满足指数分布，$N_0=10^6$（无量纲）；所有工况中虚拟颗粒数目 $N_f=3000$，其他具体计算条件参照表 4.3。

表 4.3 各种计算条件和相应的计算代价列表

算例	工况	A	B	τ_{coag}/s	τ_{brk}/s	T_1/s	T_{CPU}/s
1	Case11	2×10^{-9}	0.005	50	200	5000	492
2	Case11	10^{-8}	0.005	10	200	1000	240
3	Case11	10^{-7}	0.005	1	200	100	110
4	Case12	10^{-7}	10	1	0.1	4	570
5	Case12	10^{-7}	0.5	1	2	80	630
6	Case12	10^{-7}	0.25	1	4	160	628
7	Case13	10^{-7}	10	1	0.1	4	572
8	Case13	10^{-7}	0.5	1	2	80	616
9	Case13	10^{-7}	0.25	1	4	160	629
10	Case14	6.405×10^{-10}	0.011	1561.28	3122.56	1561.28	74

1) Case11，常凝并核和线性破碎核，离散颗粒尺度谱形式，初始单分散性颗粒群

这种工况中[34,35]，凝并核 β 为常数 A，与颗粒尺度无关；凝并特征时间尺度定义为 $\tau_{coag}=1/(AN_0)$。只有体积大于 v_0 的颗粒才有可能发生破碎，且其子颗粒的最小尺度为 v_0，破碎核 S 与母颗粒所包含的初始颗粒数目成正比，$S=B(p_n-1)$，B 为破碎核常数，p_n 为体积为 v 的母颗粒所包含的初始颗粒数目，$p_n=v/v_0$，对于初始颗粒本身而言，$p_n=1$，$S=0$；破碎特征时间尺度定义为 $\tau_{brk}=1/B$。具体数值设置见表 4.3。子颗粒满足均匀分布，母颗粒 i（体积为 v_i，包含 p_{ni}个初始颗粒）因破碎而产生子颗粒 j（体积为 v_j，包含 p_{nj}个初始颗粒）的概率 γ_{ij} 为[36]

$$\gamma_{ij}=\begin{cases}\dfrac{1}{p_{ni}-1} & p_{ni}>1\ 且\ 1\leqslant p_{nj}\leqslant p_{ni}-1\\ 0 & 其他\end{cases} \tag{4.31}$$

假设 r 为位于[0,1]、满足均匀分布的随机数，则子颗粒 j 的尺度 v_j 如下确定[36]：

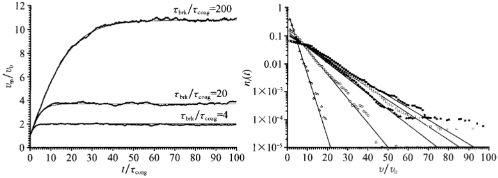
$$v_j=v_0\{\text{integer}[r(p_{ni}-1)]+1\} \tag{4.32}$$

式中：integer[ ]表示取整数。另外一颗子颗粒 k 的尺度为 $v_k=v_i-v_j$。

颗粒比平均体积 v_m 定义为颗粒平均体积 $\langle v\rangle$ 与初始时刻颗粒平均体积 v_0 的比值，该工况中 v_m 及稳定状态下比平均体积 $v_{m,eq}$ 的理论分析解参照文献[6]、[36]。图 4.13(a)为颗粒比平均体积 v_m随时间的演变规律。由于子颗粒的最小尺度为 v_0，随着时间演变，v_m只可能不断增大，表明颗粒数目不断减少，在此竞争过程中颗粒凝并领先于破碎，但是随着时间的进一步推移，v_m逐渐稳定，表明颗粒数目趋于稳定，颗粒破碎和凝并达到平衡。通过设定不同的凝并核常数 C 和破碎核常数 B 可控制稳定状态下的颗粒比平均体积 v_m。数值模拟结果与理论分析解符合很好。

颗粒尺度分布 n_i 表示时刻 t 处、包含 p_{ni} 个原始颗粒的那些颗粒的总数目

$N_i(t)$ 与颗粒总数目 $N(t)$之比，$\sum_i n_i = \sum_i N_i/N(t) = 1$，$n_i$的理论分析解参照文献[36]。图 4.13(b)为 $\tau_{brk}/\tau_{coag}=200$ 计算条件下颗粒尺度分布随时间的演变，数值模拟结果表明，即使颗粒演变开始不久($t=3\tau_{coag}$)，直到较长的颗粒演变时间之后($t=100\tau_{coag}$)，也仍然存在指数形式的颗粒尺度分布。数值模拟结果与理论分析解符合很好。



(a) v_m 随时间的演变

(b) $n_i(t)(\tau_{brk}/\tau_{coag}=200)$

— MMC 算法解；— 理论分析解

$\tau_{brk}/\tau_{coag}=200$；▵ $t/\tau_{coag}=3$；◦ $t/\tau_{coag}=10$；· $t/\tau_{coag}=20$；◦ $t/\tau_{coag}=30$；· $t/\tau_{coag}=100$；— 理论分析解

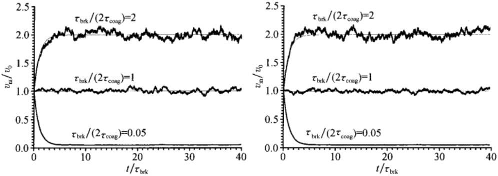
图 4.13 Case11 中颗粒尺度谱的时间演变

2) Case12 和 Case13，常凝并核和常破碎核，连续颗粒尺度谱形式，初始单分散性颗粒群

这两种工况下[34,35]，凝并核 β 为常数 A，破碎核 S 为常数 B，与 Case16 不同的是任何颗粒均存在破碎的概率。这两个工况的差异则在于：Case12 中破碎产生的子颗粒尺度满足均匀分布，子颗粒 j 的尺度为 $v_j=rv_i$，另外一颗子颗粒尺度 $v_k=(1-r)v_i$；而 Case13 中破碎产生的两颗子颗粒尺度相同，$v_j=v_k=0.5v_i$。两种工况中 v_m和 $v_{m,eq}$的理论分析解参照文献[36]。

图 4.14 为 Case12 和 Case13 的 v_m 随时间的演变规律，由于子颗粒尺度是连续分布的，随着初始时刻开始，v_m 可能不断增大也可能不断减小，这取决于凝并核和破碎核的比值。但是随着时间的进一步推移，v_m 都将逐渐稳定至 $v_{m,eq}$，此时颗粒数目趋于稳定，颗粒的破碎和凝并达到平衡。模拟结果与理论解都符合很好。

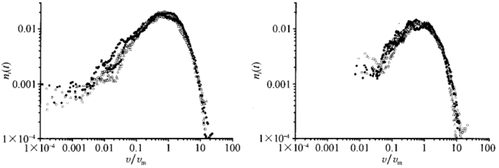
在 Case12 和 Case13 中、$\tau_{brk}/2\tau_{coag}=1$ 的计算条件下颗粒尺度分布随时间的演变如图 4.15 所示，颗粒尺度分布基本为自保持(self-preserving)曲线[23]，当颗粒尺度较小时($v/v_m \ll 1$)，颗粒尺度分布曲线离散得较为严重，这主要是由于统计颗粒尺度分布时，采用的是离散分类的方法，在最大颗粒尺度和最小颗粒尺度之间划分成若干个区间，通过统计每个尺度区间范围内的颗粒数目来得到尺度分布曲线。



(a) Case12　　(b) Case13

图 4.14　颗粒比平均体积随时间的演变(Case12 和 Case13)
—— MMC 算法解；---- 理论分析解

通过进一步改进统计方法有望减少误差，另外计算机本身的计算精度不足(本程序中采用双精度型数据类型)也是误差原因之一。图 4.15 中为按照对数分类方法划分为 200 个区间的统计结果。



(a) Case12　　(b) Case13

图 4.15　颗粒尺度分布随时间的演变(Case17 和 Case18, $\tau_{brk}/2\tau_{coag}=1$)
▵ $t/\tau_{brk}=3$；◦ $t/\tau_{brk}=10$；• $t/\tau_{brk}=20$；◦ $t/\tau_{brk}=30$；• $t/\tau_{brk}=40$

图 4.16(a)为 Case12 和 Case13 中、$\tau_{brk}/2\tau_{coag}=1$ 计算条件下标准化(normalized)颗粒尺度分布[定义为 $n_g(v)=n_i(t)/v$]，此时，由于颗粒的破碎和凝并达到平衡，颗粒数目从初始时刻开始直到很长的演变时间之后均基本保持不变，颗粒标准化尺度分布也基本与时间无关，图 4.16(a)中描绘的散点是 $t=40\tau_{brk}$ 时的模拟结果，在最大颗粒尺度和最小颗粒尺度之间按照对数分类方法划分成 200 个区间。当 $v/v_m<1$ 时，Diemer 等[37]给出了标准化尺度分布的近似解，如图 4.16(a)中的两条斜率不同的直线，Case12 和 Case13 的近似解的直线斜率分别为 $-2/3$ 和 -0.415。数值模拟结果与近似解能够达到定性符合，颗粒尺度较小处存在一定误差。

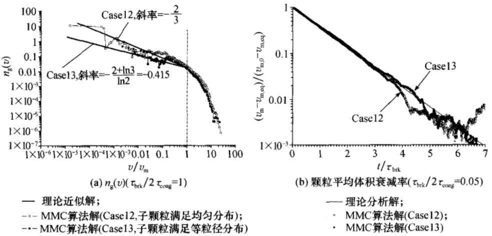


图 4.16　Case12 和 Case13 尺度谱演变特征

图 4.16(b)为颗粒平均体积衰减率曲线,颗粒尺度较大处与理论值符合相当好,颗粒尺度较小处离散得较为严重,其误差原因与前面的分析是一脉相承的。

3) Case14,常凝并核和线性破碎核,连续颗粒尺度谱形式,初始指数分布的多分散性颗粒群

该工况[35]实际上是 Case11(Baltz-Tobolsky 问题[6])的连续颗粒尺度谱形式,即 $\gamma(u,v)=1/v, b(u)=2, S(u)=Bu, \beta(v,u)=A$,子颗粒尺度谱满足均匀分布。Patil 和 Andrews[8]得到了这种工况的理论分析解。当 $B=2v_{g0}/A$ 的条件被满足时,凝并和破碎达到平衡,即颗粒总数目浓度保持不变,颗粒尺度谱保持稳定,仍然维持初始时刻的颗粒尺度分布函数。数值模拟中,初始颗粒尺度谱满足指数分布[参照公式(4.30)],$v_{g0}=0.029$,不同时刻处颗粒尺度分布曲线如图 4.17(a)所示。

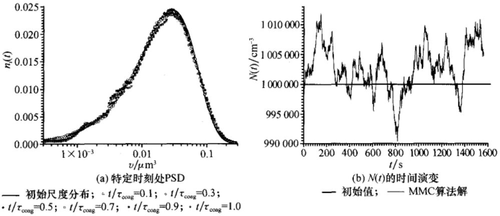


图 4.17　Case14 中颗粒尺度分布函数的时间演变

这里初始时刻的颗粒尺度谱被按照对数分类法则离散为 200 个区间。在任意时刻点，从 MMC 算法统计得到的颗粒尺度分布曲线仍然保持初始时刻的曲线形式，即达到平衡稳定状态。而图 4.17(b)所示的颗粒总数目在初始数值(10^6)附近脉动，误差不超过 1%。MMC 算法对于该工况中颗粒尺度分布函数和颗粒总数目浓度的准确描述表明其能够合理地描述初始多分散性颗粒群工况中同时发生的凝并和破碎。

MMC 算法对于同时发生凝并和破碎的 4 种工况、10 个算例的计算代价[34,35]如表 4.3 所示，所耗费的 CPU 事件一般控制在几百秒之内，如此低的计算代价有利于 MMC 算法用于工程领域的数值模拟。

4.3 多重 Monte Carlo 算法小结

基于目前已存在的零维颗粒群平衡模拟的 MC 算法的种种缺陷，充分考虑到多维颗粒群平衡模拟的各种需求，我们发展了一种全新的多重 Monte Carlo 算法。MMC 算法引入加权“虚拟颗粒”的概念，认为尺度相同或相近的实际颗粒具有相同的动力学属性，被若干数目少得多的虚拟颗粒所代表，虚拟颗粒群与实际颗粒群在颗粒尺度分布函数这个参数上具有相同的统计意义。加权“虚拟颗粒”的引入，使得 MMC 算法能够跟踪数目较少的虚拟颗粒，不仅具备适用于工程计算的计算代价，且可以抛弃“子系统”概念而模拟整体系统的颗粒尺度分布函数的动力学演变过程；另外，加权“虚拟颗粒”的引入也使得该 MC 方法可以通过调整参与动力学事件的相关虚拟颗粒的数目权值和尺度来体现动力学事件的结果，且能够保持恒定的虚拟颗粒数目从而具备较高的计算精度，能够保持常计算区域体积从而可以方便地应用于工程实际计算和科学定量分析；MMC 算法基于时间驱动技术，具备非常强的扩展能力，不但可以方便地单独考虑凝并、破碎、冷凝/蒸发、成核、沉积等动力学事件，也可以考虑几个同时发生动力学事件，甚至可以与求解颗粒运动方程的算法耦合起来，不但描叙颗粒尺度分布函数的变化，而且描叙颗粒的速度场等属性，并可进而扩展到考虑颗粒场和气相场演变的两相湍流模型中去，这部分的研究内容将在第 5 章中详细介绍。

我们利用特殊工况下的理论分析解、详细验证了 MMC 算法对于初始单分散性或多分散性颗粒群、单动力学事件或复合动力学事件、各种动力学事件的典型核模型等的描述精度，MMC 算法对 14 个特殊工况的数值模拟结果充分证明 MMC 算法对于纯凝并、破碎等动力学事件、对于同时发生的凝并和破碎等复合动力学事件均具有较高的计算精度和计算效率。

4.4 节将把 MMC 算法与其他几种主流 MC 方法进行定量比较，分析 MMC 算法的误差来源，以期进一步改进其计算精度和计算效率。

4.4 零维颗粒群平衡模拟 Monte Carlo 方法的性能定量评判方法

4.4.1 为什么要进行几种 Monte Carlo 方法的定量比较

MMC 算法对各种特殊工况进行数值模拟，模拟结果与相应的理论分析解或数值解进行比较，证明其具有较高的计算精度，且计算代价通常较低。但是，对于某些工况，如初始指数分布的多分散性颗粒群所经历的布朗凝并核工况，MMC 算法仍然存在一定的数值误差。另外，对于随机算法而言，由于其通常具有比矩方法等欧拉方法更多的计算资源消耗，所以计算代价一直是评判 MC 方法性能优劣的重要指标之一。由于 MMC 算法涉及多个子过程的耦合，且 MMC 算法对于各种动力学事件的处理方法各异，对其进行数值误差分析和计算代价分析是一个较为艰巨的任务。可行策略是把 MMC 算法与目前已经发表并得到广泛应用的几种主流 MC 方法进行定量比较，在比较中充分理解 MMC 算法的计算精度和计算效率损耗的原因，即找出数值误差和数值负担的来源。然后在对 MMC 算法的数值精度和计算效率进行全面理解的基础上，对其进行改进，以尽可能提高其计算精度和计算效率。

目前几种主流的 MC 方法为：Matsoukas 等[2,24,36]发展的常数目法（constant number method），属于事件驱动的 MC 方法；Maisels 等[30,38]发展的阶梯式常体积法（stepwise constant volume method），属于事件驱动的 MC 方法和阶梯式常数目法；Liffman[4]所发展的直接模拟 Monte Carlo 方法（本书称之为时间驱动 DSMC 方法，time-driven direct simulation Monte Carlo，DSMC），属于时间驱动 MC 方法、阶梯式常体积法和阶梯式常数目法；而多重 Monte Carlo 算法同时属于常数目法、常体积法和基于时间驱动的 MC 方法。以上几种方法都经过了较为全面的验证，且均具有较高的计算精度。Maisels 等[38]使用一个同时发生凝并、生长和成核的实际工况比较了阶梯式常体积法和常数目法的计算精度和计算代价，他们利用可能存在数值误差的离散-分区法的计算结果作为评判标准；另外，阶梯式常体积法在颗粒数目增长的工况中需要进行颗粒的随机抛弃动作，将带来一定的误差，而文献[38]的工况中颗粒总数目不断衰减，阶梯式常体积法不需要进行倍减动作，故无法评判颗粒数目不断增加时两种 MC 方法的计算精度；至关重要的一点是，对于这种同时发生几个动力学事件的工况，难以分析 MC 误差的真实来源。所以，文献[38]得到的结论——即阶梯式常体积法比常数目法更精确和更快——并不完全令人信服。

4.4.2 Monte Carlo 方法定量比较的策略

我们设计如下策略来实现四种 MC 方法(即时间驱动直接模拟 Monte Carlo 方法、阶梯式常体积法、常数目法和多重 Monte Carlo 算法)的定量比较:

(1) 分别比较各种 MC 方法对各种单独动力学事件工况的描述精度和计算代价。这是因为同时发生多个动力学事件的工况中,难以判定数值误差是由哪种事件所主导。

(2) 比较各种 MC 方法对于颗粒总数目浓度 N(颗粒尺度分布的零阶矩)、颗粒总质量浓度 M(颗粒尺度分布的一阶矩)以及特定时刻的颗粒尺度分布函数的计算精度。这是因为,求解零维 GDE 的 MC 方法的重要任务就是描述颗粒尺度分布函数的时间演变过程,是否能对该关键时间变量进行准确描述是评判这种 MC 方法性能优劣的最重要指标;但是,另外一方面,某些工况中颗粒尺度谱保持稳定或近似稳定(如初始单分散性颗粒群经历纯沉积、纯成核、纯冷凝等动力学演变时),此时利用颗粒尺度分布的两个关键的统观参数,即 N 和 M 可以评判 MC 方法的性能。对于单组分颗粒群,通常把颗粒总体积浓度和颗粒总质量浓度等同起来。

(3) 仍然采用特殊工况中的理论分析解作为 MC 方法模拟结果的数值精度的评判标准。这是因为其他 GDE 数值方法,如离散-分区法,本身即存在一定的数值误差。

(4) 通过颗粒数目浓度、颗粒质量浓度和颗粒尺度分布函数的整体方差来评价各种 MC 方法的性能优劣。这是因为,比较 N、M 和特定时刻颗粒尺度分布函数的 MC 方法模拟结果与相应的理论分析解,虽然能够清晰地得到某时刻模拟结果与理论解的偏离,但是无法从整体的角度来评价 MC 方法的性能,无法依据一些定量的指标来评判 MC 算法对于某种动力学事件的描述精度,而通过得到这些参数的整体方差将建立一个评判 MC 方法性能的定量体系。

(5) 仅仅针对初始单分散性颗粒群工况。因为 MC 方法跟踪的是离散的颗粒群,对于具有连续函数形式(如指数函数或对数正态函数)分布规律的初始多分散性颗粒群,MC 方法需要对其进行离散和初始化,这将带来一定程度的离散误差,这种误差的存在不利于辨明 MC 方法本身存在的数值误差。

(6) 为了减少随机算法本身的统计误差,这里采用不同的随机数产生种子(seeds)对所有工况均进行三次 MC 循环计算,并取平均值作为最终的数值模拟结果。

(7) 通过比较不同 MC 方法完成同一任务的 CPU 时间来评判它们的计算代价。由于 MC 方法的计算代价与模拟颗粒数目关系密切,而阶梯式常体积法和时间驱动 DSMC 方法无法始终保持模拟过程中模拟颗粒数目不变(冷凝工况除外),我们设定这些 MC 方法具有同样的初始模拟颗粒数目。

4.4.3 Monte Carlo 方法的性能定量评判准则

在 MC 方法定量比较的策略的指导下，我们发展了 MC 方法的性能定量评判准则，核心思想是建立各种关键常数（颗粒数目浓度、颗粒质量浓度、颗粒尺度分布函数）的平均误差或平均方差，这些平均方差综合考虑的 MC 方法在一段时间之内的整体性能。我们把这些平均方差作为评判 MC 方法计算精度的主要指标。

第 i 次 MC 循环中、t 时刻颗粒数目浓度 N 的瞬时平均方差 $\sigma_{N,i}(t)$ 定义如下：

$$\sigma_{N,i}(t)=\sqrt{\frac{1}{t}\int_0^t\left(\frac{N(t)-N(t)_{\text{theory}}}{N(t)_{\text{theory}}}\right)^2\mathrm{d}t} \tag{4.33}$$

式中：$N(t)$ 为时刻 t 处颗粒数目浓度的 MC 模拟结果；$N(t)_{\text{theory}}$ 为 t 时刻处颗粒数目浓度的理论值。

$\sigma_{N,i}(t)$ 的离散形式计算公式为

$$\sigma_{N,i}(t)=\sqrt{\frac{1}{L}\sum_{j=1}^{L}\left(\frac{N_j-N_{j,\text{theory}}}{N_{j,\text{theory}}}\right)^2} \tag{4.34}$$

式中：L 为 $0\sim t$ 范围内离散的时间窗口的数目；N_j 为第 j 个时间窗口，即 $t=\sum_{m=1}^{j}\Delta t_m$ 时刻处的颗粒数目浓度的 MC 方法模拟值；$N_{j,\text{theory}}$ 为对应时刻处的颗粒数目浓度理论值。多次 MC 循环的颗粒数目浓度 N 的瞬时平均方差 $\sigma_N(t)$ 为

$$\sigma_N(t)=\frac{1}{Q}\sum_{i=1}^{Q}\sigma_{N,i}(t) \tag{4.35}$$

式中：Q 为 MC 循环的次数。

同样，颗粒质量浓度 M 的瞬时平均方差 $\sigma_M(t)$ 为

$$\sigma_{M,i}(t)=\sqrt{\frac{1}{t}\int_0^t\left(\frac{M(t)-M(t)_{\text{theory}}}{M(t)_{\text{theory}}}\right)^2\mathrm{d}t}=\sqrt{\frac{1}{L}\sum_{j=1}^{L}\left(\frac{M_j-M_{j,\text{theory}}}{M_{j,\text{theory}}}\right)^2}$$
$$\sigma_M(t)=\frac{1}{Q}\sum_{i=1}^{Q}\sigma_{M,i}(t) \tag{4.36}$$

类似地，对于初始单分散性颗粒群工况，可以定义颗粒尺度分布函数的整体方差为

$$\sigma_{d,i}(t)=\sqrt{\frac{1}{v_{\max}-v_{\min}}\int_{v_{\min}}^{v_{\max}}\left[\frac{N(v,t)/N(t)-(N(v,t)/N(t))_{\text{theory}}}{n_{\text{total}}}\right]^2\mathrm{d}t}$$
$$=\sqrt{\frac{1}{v_{\max}-v_{\min}}\int_{v_{\min}}^{v_{\max}}\left(\frac{P(v,t)-P(v,t)_{\text{theory}}}{n_{\text{total}}}\right)^2\mathrm{d}t} \tag{4.37}$$

式中：$N(v,t)$ 表示 t 时刻尺度为 v 的颗粒的数目浓度；$P(v,t)=N(v,t)/N(t)$ 表示

t 时刻从颗粒群中得到尺度为 v 的颗粒的概率；n_{total} 为无量纲的颗粒数目浓度，$n_{\text{total}}=1/\bar{v}=N(t)_{\text{theory}}v_0/M(t)_{\text{theory}}$（对于凝并破碎工况），$\bar{v}$ 为无量纲的颗粒平均尺度。如果在方程中不引入 n_{total}，颗粒尺度分布函数的整体方差 $\sigma_d(t)$ 随时间演变而不断减小，这显然不能严格度量颗粒尺度分布函数的数值计算误差。而在凝并工况中，随时间增长颗粒平均尺度不断增大，在该方程中引入 n_{total} 之后，$\sigma_d(t)$ 随时间演变而不断增长，更能形象地描述颗粒尺度分布函数的计算误差。离散形式的 $\sigma_{d,i}(t)$ 如下：

$$\sigma_{d,i}(t)=\sqrt{\frac{1}{k_{\max}-k_{\min}+1}\sum_{j=k_{\min}}^{k_{\max}}\left(\frac{P_j(t)-P_j(t)_{\text{theory}}}{n_{\text{total}}}\right)^2} \tag{4.38}$$

式中：$k_{\max}$ 和 $k_{\min}$ 分别为颗粒群中尺度最大和最小的颗粒所包含的单体颗粒（初始颗粒）的数目，$K=k_{\max}-k_{\min}+1$ 为颗粒尺度谱的离散区间数目；$P_j(t)$ 为 t 时刻得到含有 j 个单体的颗粒的概率。

Q 次 MC 循环的颗粒尺度分布函数整体方差的平均值 $\sigma_d(t)$ 为

$$\sigma_d(t)=\frac{1}{Q}\sum_{i=1}^{Q}\sigma_{d,i}(t) \tag{4.39}$$

4.5 几种主流 Monte Carlo 方法的比较

为了对以上四种主流的 MC 方法进行较为全面的评判，本节选择纯凝并（颗粒数目减少而颗粒总质量不变）、纯破碎（颗粒数目增加而颗粒总质量不变）、纯冷凝/蒸发（或表面生长/消融）（颗粒质量变化而颗粒总数目不变）、纯成核（颗粒总质量和总数目都增加）和纯沉积（颗粒总质量和总数目都减少）等五种理想工况，来详细比较和分析以上四种 MC 方法的计算精度和计算代价，并讨论其各自的优缺点和适用范围。

本节所有工况中，初始颗粒尺度分布均满足单分散性分布，且初始颗粒尺度 $v_0=1$（无量纲）。对于常数目法，由于 Lin 等[2]已经证明质量法比数目法更为稳定、对各种复杂工况的适用性更强，以下所有常数目法均采用质量法来实现。如无特别说明，常数目法利用接受-拒绝法来实现主颗粒的选择；而阶梯式常体积法则采用累积概率法来选择主颗粒。

4.5.1 纯凝并工况

所有 MC 方法描述动力学事件的难点均是颗粒凝并，计算代价的消耗也最多。颗粒凝并一直是 MC 方法的重点。对凝并处理的难点很大程度上是由于一次凝并事件有两颗颗粒参与。

1) Case1，常凝并核工况

选择凝并核 $\beta_{ij}=A=10^{-10}\,m^3/s$，初始颗粒数目浓度为 $N_0=10^{10}\,m^{-3}$，颗粒特征凝并时间尺度定义为 $\tau_{coag}=1/(N_0A)$，具体计算条件参照表 4.4。

表 4.4 Case1～7 的计算条件和计算代价[1)]

工 况	参 数	阶梯式常体积法[2)]	常数目法[2)]	时间驱动 DSMC	MMC 算法
Case1，常凝并核工况	N_{s0}	1000	1000	1000	1000
	T_l(s)	$10^4\tau_{coag}$	$10^4\tau_{coag}$	$10^4\tau_{coag}$	$10^4\tau_{coag}$
	α	—	—	0.01	0.01
	T_{cpu}(s)	18.07	45.15	5.55	13.01
Case2，线性凝并核工况	N_{s0}	2000	2000	2000	2000
	T_l(s)	τ_{coag}	τ_{coag}	τ_{coag}	τ_{coag}
	α	—	—	0.005	0.005
	T_{cpu}(s)	23.52	71.67	41.30	208.79
Case3，二次方凝并核工况	N_{s0}	2000	2000	2000	2000
	T_l(s)	τ_{coag}	τ_{coag}	τ_{coag}	τ_{coag}
	α	—	—	0.01	0.01
	T_{cpu}(s)	14.81[3)](12.43[4)])	49.97[4)](54.18[3)])	49.13	241.80
Case4，破碎工况	N_{s0}	3000	3000	3000	3000
	T_l(s)	$1000\tau_{brk}$	$1000\tau_{brk}$	$1000\tau_{brk}$	$1000\tau_{brk}$
	α	—	—	0.0002	0.0002
	T_{cpu}(s)	6.55	2.99	21.71	20.59
Case5，冷凝工况	N_{s0}	3000	3000	3000	3000
	T_l(s)	$4\tau_{cond}$	$4\tau_{cond}$	$4\tau_{cond}$	$4\tau_{cond}$
	α	—	—	0.01	0.001
	T_{cpu}(s)	101.28	104.68	47.39	578.01
Case6，成核工况	N_{s0}	3000	3000	3000	3000
	T_l(s)	$5\tau_{nucl}$	$5\tau_{nucl}$	$5\tau_{nucl}$	$5\tau_{nucl}$
	α	—	—	—	—
	T_{cpu}(s)	6.51	3.01	6.59	29.60
Case7，沉积工况	N_{s0}	3000	3000	3000	3000
	T_l(s)	$12\tau_{depo}$	$12\tau_{depo}$	$12\tau_{depo}$	$12\tau_{depo}$
	α	—	—	0.00033	0.001
	T_{cpu}(s)	13.02	23.81	29.90	142.02

1) 所有工况的内存消耗均为 $O(N_s)$，N_s 为模拟颗粒数目。
2) 在其他工况中，阶梯式常体积法均采用累积概率法实现，而常数目法采用接受-拒绝法实现。
3) 表示该种事件驱动 MC 采用累积概率法实现。
4) 表示该种事件驱动 MC 采用接受-拒绝法实现。

常凝并核工况中 $N(t)$、$M(t)$、特定时刻颗粒尺度分布函数 P_k、$\sigma_N(t)$、$\sigma_M(t)$、$\sigma_d(t)$ 的曲线如图 4.18 所示。综合考察图 4.18，可以发现，两种时间驱动 MC 方法（时间驱动 DSMC 方法和 MMC 方法）和常数目法对于颗粒数目浓度 N 和颗粒质量浓度 M 的描述精度在同一等级上，均低于阶梯式常体积法的描述精度，阶梯式常体积法几乎精确描述了颗粒数目浓度的时间变化规律。而两种事件驱动 MC 方法（阶梯式常体积法和常数目法）严格保持凝并过程中颗粒尺度分布的一阶矩即颗粒总质量浓度 M 不变，而两种时间驱动 MC 方法表现出一定程度的误差，其中 MMC 算法的误差更大一些。这种数值误差的产生直接关联于时间步长的计算方案。时间驱动 MC 方法在一个时间步长内认为各个动力学事件互相解耦，无法精确确定两次动力学事件之间的等待时间，必将产生一定程度的误差；阶梯式常体积法精确计算等待时间；而采用质量法实现的常数目法在严格维持 M 不变的同时，基于第 $k-1$ 次凝并事件之后颗粒群的平均尺度 $\langle v\rangle_{k-1}$ 来计算两次凝并事件之间的时间间隔 Δt_k：

$$\Delta t_k = \frac{1}{V_{k-1}R_{\mathrm{coag},k}} = \frac{1}{R_{\mathrm{coag},k}}\frac{N_{k-1}}{N_{\mathrm{s}}} = \frac{1}{R_{\mathrm{coag},k}}\frac{M_{k-1}}{N_{\mathrm{s}}\langle v\rangle_{k-1}} \tag{4.40}$$

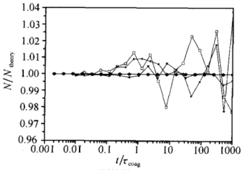
式中：N_{s} 为模拟颗粒总数目，在常数目法中为常数；V 为计算区域体积；R_{coag} 为凝并速率（$\mathrm{m^{-3}\cdot s^{-1}}$）。

事件驱动 MC 的优点在于不需要指定时间步长，而可以依据实际发生的动力学事件来计算等待时间。对于常数目法而言，在第 $k-1$ 次凝并事件之后，两颗模拟颗粒合二为一，将留下一个空隙，此时随机选择一颗模拟颗粒（尺度为 v'_{k-1}）用于填充某颗主颗粒所留下的空隙。如果基于颗粒尺度 v'_{k-1} 来计算两次凝并事件之间的时间间隔 $\Delta t'_k$：

$$\Delta t'_k = \frac{1}{V_{k-1}R_{\mathrm{coag},k}} = \frac{1}{R_{\mathrm{coag},k}}\frac{M_{k-1}}{N_{\mathrm{s}}v'_{k-1}} \tag{4.41}$$

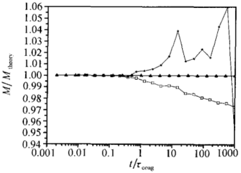
则可以精确描述颗粒数目浓度的时间演变过程，如图 4.18(a)和(d)所示，采用方程(4.41)的常数目法与阶梯式常体积法的精度处于同一水平。实际上，多次随机选择的 v'_{k-1} 的平均值即为 $\langle v\rangle_{k-1}$，所以 $\Delta t'_k$ 的平均值即为 Δt_k，但是 $\Delta t'_k$ 体现了实时发生的动力学事件对于等待时间的影响，所以能够精确描述颗粒数目浓度。然而，方程(4.40)更为通用，适合于一般工况（如非质量守恒的离散系统内颗粒动力学演变[2]），所以本书仍然基于 $\langle v\rangle_{k-1}$ 来计算两次凝并事件之间的时间间隔 Δt_k。

对于颗粒尺度分布函数这个关键目标参数的描述上，四种 MC 方法的精度几乎一致，在经历了短暂的初始过渡期之后，四种 MC 方法的 $\sigma_d(t)$ 曲线收敛在一起，且与时间尺度存在明显的指数法则关系，即 $\sigma_d(t)\sim t^{0.54}$。值得注意的是，对于颗粒尺度谱的高端部分，即对于那些尺度较大的颗粒类，由于该类颗粒的数目越来越



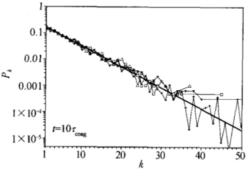
(a)颗粒数目浓度

—▵— 阶梯式常体积法； —▾— 常数目法[公式(4.40)]；
—♦— 常数目法[公式(4.40)]； —▫— 时间驱动DSMC方法；
—⋆— MMC算法



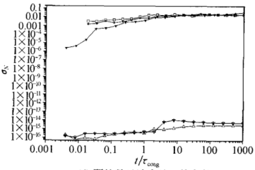
(b)颗粒质量浓度

—▵— 阶梯式常体积法； —▾— 常数目法；
—▫— 时间驱动DSMC方法； —⋆— MMC算法



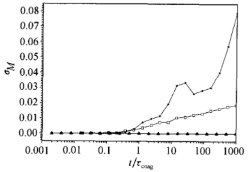
(c) 颗粒尺度分布

—— 理论分析解； —▵— 阶梯式常体积法；
—▾— 常数目法； —▫— 时间驱动DSMC方法；
—⋆— MMC算法



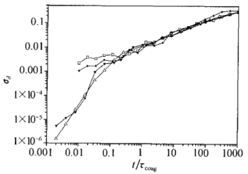
(d) 颗粒数目浓度的平均方差

—▵— 阶梯式常体积法； —▾— 常数目法[公式(4.40)]；
—♦— 常数目法[公式(4.41)]； —▫— 时间驱动DSMC方法；
—⋆— MMC算法



(e) 颗粒质量浓度的平均方差

—▵— 阶梯式常体积法； —▾— 常数目法；
—▫— 时间驱动DSMC方法； —⋆— MMC算法



(f) 颗粒尺度分布函数的整体方差

—▵— 阶梯式常体积法； —▾— 常数目法；
—▫— 时间驱动DSMC方法； —⋆—MMC算法

图 4.18　Case1,常凝并核工况

小，几种 MC 方法的计算结果均与理论解越来越偏离，如图 4.18(c)所示，但是 MMC 算法的误差更小一些，基本围绕理论分析解脉动，这是因为 MMC 算法引入了加权虚拟颗粒的概念，那些数目较小的颗粒类仍然可以被一些数目权值较小的虚拟颗粒所代表，而这些采用子系统概念的那些 MC 方法(时间驱动 DSMC 方法、阶梯式常体积法和常数目法)，由于具有统一的数目权值，无法代表这些数目很少的颗粒类，更无法跟踪其动力学演变过程。

对于常凝并核，时间驱动 MC 方法比事件驱动 MC 方法更为省时，而阶梯式常体积法和时间驱动 DSMC 方法分别比它们各自的竞争对手，即常数目法和 MMC 算法，计算代价更小，这主要归因于阶梯式常体积法和时间驱动 DSMC 方法的模拟颗粒数目总是在 $N_{s0}/2\sim N_{s0}$之间，而常数目法和 MMC 算法的模拟颗粒数目总是 N_{s0}。

2) Case2，线性凝并核工况

选择凝并核 $\beta_{ij}=A(v_i/v_0+v_j/v_0)=10^{-10}(v_i/v_0+v_j/v_0)\text{m}^3/\text{s}$，$N_0=10^{10}\text{m}^{-3}$，$\tau_{\text{coag}}=1/(AN_0)$，具体计算条件参照表 4.4，结果如图 4.19 所示。

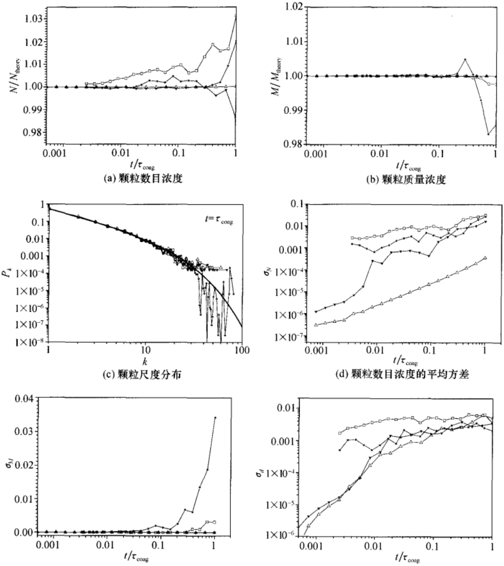
与 Case1 的情形类似，两种时间驱动 MC 及常数目法对于颗粒数目浓度的描述精度在一个水平，而均明显低于阶梯式常体积法，阶梯式常体积法精确描述了 N 的时间演变过程；两种事件驱动 MC 方法均严格保持颗粒总质量守恒，而两种时间驱动 MC 方法表现出一定程度的误差，特别是 MMC 算法对于 M 的误差相比较于其他三种 MC 方法尤为明显，虽然实际上其误差精度控制在 2%以内；四种 MC 方法均较好地描述了特定时刻的颗粒尺度分布，而 MMC 算法在颗粒尺度谱的高端部分精度更高一些，但是整体而言几种 MC 方法对颗粒尺度分布函数的描述在同一水平。

对于线性凝并核工况，事件驱动 MC 方法通常比时间驱动 MC 方法更省时，但是，具体的 CPU 消耗方面，阶梯式常体积法＜时间驱动 DSMC 方法＜常数目法＜MMC 算法，这主要是由于前两种 MC 方法中跟踪的颗粒数目总是小于等于后两种 MC 方法中跟踪的模拟颗粒数目，由于 MC 方法处理凝并时需要对模拟颗粒进行二重循环，所以处理较少的模拟颗粒将省时得多，这时 CPU 的节省甚至超出了时间驱动 MC 的低效率。

3) Case3，二次方凝并核工况

选择凝并核 $\beta_{ij}=A(v_i/v_0\times v_j/v_0)=10^{-10}(v_i/v_0\times v_j/v_0)\text{m}^3\cdot\text{s}^{-1}$，$N_0=10^{10}\text{m}^{-3}$，$\tau_{\text{coag}}=1/(AN_0)$，具体计算条件参照表 4.4，结果如图 4.20 所示。

这种工况中，两种时间驱动 MC 对于颗粒数目浓度的相对误差在 4%之内，常数目法对 N 的相对误差在 2%以内，而阶梯式常体积法仍然保持了其对于凝并事件的精确描述性能，高精度地描述了 N 和 M 的时间演变，常数目法也精确描述了 M，时间驱动 DSMC 也较高精度地描述了 $M(t)$，而 MMC 算法无法严格保持颗粒



(a) 颗粒数目浓度　(b) 颗粒质量浓度

(c) 颗粒尺度分布　(d) 颗粒数目浓度的平均方差

(e) 颗粒质量浓度的平均方差　(f) 颗粒尺度分布函数的整体方差

图 4.19　Case2，线性凝并核工况

—— 理论分析解； -△- 阶梯式常体积法； -•- 常数目法； -□- 时间驱动 DSMC 方法； -·- MMC 算法

总质量不变，相对误差在 3%范围内。相比较于常凝并核工况和线性凝并核工况，这种工况的颗粒尺度谱急剧扩展，虽然四种 MC 方法都相对高精度地描述了颗粒尺度谱的低端部分[如图 4.20(c)中 $k<12$ 的部分]，但是只有 MMC 算法的特定时刻颗粒尺度分布函数的模拟结果仍然围绕理论分析解波动，而其他三种 MC 均明显偏离了理论分析解，甚至无法考虑到那些尺度较大、而数目较少的颗粒(如含有

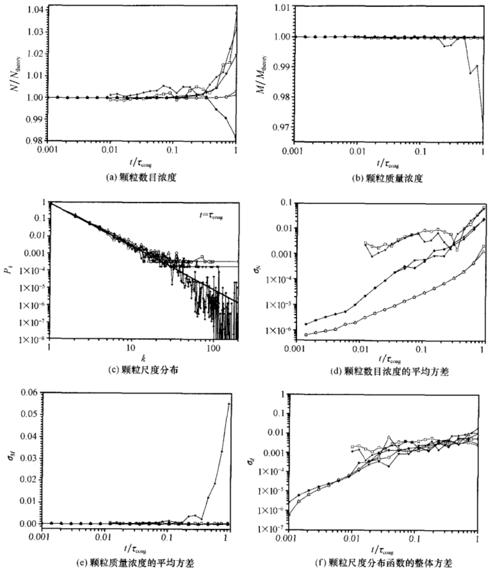


图 4.20　Case3，二次方凝并核工况

—— 理论分析解；-∘- 阶梯式常体积法(接受拒绝法)；-▵- 阶梯式常体积法(累积概率法)；-·- 常数目法(接受拒绝法)；-•- 常数目法(累积概率法)；-▫- 时间驱动 DSMC 方法；-⋆- MMC 算法

100 个以上单体的颗粒)。

利用这种工况考察了两种事件驱动 MC 方法采用累积概率法或接受-拒绝法实现时的性能。无论是对于颗粒数目浓度、颗粒质量浓度这些整体统计参数，还是对于颗粒尺度分布函数这种细观统计参数，采用累积概率法或接受-拒绝法实现事

件驱动 MC 方法，在计算精度上没有明显差异。但是对于同一个事件驱动 MC 方法，采用累积概率法时的计算代价要稍稍高于采用接受-拒绝法。

4）分析

（1）计算精度。

首先总结几种 MC 方法对于凝并事件中颗粒数目浓度 N 和质量浓度 M 的描述精度。综合起来，对于 $N(t)$ 和 $M(t)$，两种事件驱动 MC 方法（阶梯式常体积法和常数目法）要比时间驱动 MC 方法（时间驱动 DSMC 方法和 MMC 方法）计算精度更高。时间驱动 MC 对凝并事件的处理的主要误差来源于：在一个 Δt 内，可能同时发生若干个凝并事件，同一颗颗粒参与了多次凝并事件，同时扮演了跟踪颗粒和凝并伙伴的角色，这些动力学事件互相关联，实际上不能解耦，即存在所谓的"解耦误差"。时间步长越小，其内凝并事件越少，解耦误差越小。时间驱动 MC 方法一般通过调整乘积因子 α 来减小时间步长和解耦误差，但是计算代价将相应地增大。由于时间驱动 MC 方法无法精确地计算两次动力学事件之间的等待时间，这种解耦误差是它无法完全避免的，这种解耦误差严重制约了时间驱动 MC 方法的计算精度。而在事件驱动 MC 方法中，所有凝并事件被逐一离散，即一个凝并事件接着一个凝并事件发生，不可能存在一颗模拟颗粒参与多次凝并事件和扮演多重身份的问题，这种 MC 方法能够精确地依据当前的事件发生速率来计算两个动力学事件之间的时间间隔，所以精确描述了凝并事件，不存在解耦误差。

对于时间驱动 DSMC 方法而言，另外一个误差源是：由于每个时间步长之内，时间驱动 MC 方法的凝并事件数目无法控制，当需要倍增子系统时，模拟颗粒数目并不一定恰恰是初始模拟颗粒数目的一半，此时需要在复制现有模拟颗粒之后随机添加或者抛弃一定数目的模拟颗粒，使得新的子系统内模拟颗粒数目恢复初始数值，这个过程将导致一定的误差，称为"阶梯式误差"。而阶梯式常体积法尽管也采用倍增子系统的方法，但是由于凝并事件被离散地处理，即每个离散的时间间隔之后只可能发生一次凝并事件，所以，在模拟颗粒数目恰恰等于初始模拟颗粒数目的一半时，倍增子系统和复制现有模拟颗粒后，子系统内模拟颗粒数目将恰好等于初始数目，所以对于二元凝并事件，阶梯式常体积法不存在阶梯式误差。常数目法和 MMC 算法由于恒定地保持模拟颗粒数目，也不存在这种误差。

对于 MMC 算法而言，当演变时间较长时，N 和 M 的相对误差越来越大，这主要是由于虚拟颗粒数目权值之间的差距越来越大。严格来说，MMC 算法对凝并事件进行处理时，只有当前跟踪的虚拟颗粒 i 的数目权值 w_i 等于其凝并伙伴 j 的数目权值 w_j 时，或者两虚拟颗粒的尺度相等（$v_i=v_j$）时，才能严格地保持颗粒数目浓度和质量浓度符合实际过程[见式(4.21)]。如果 w_i 与 w_j 的差距较小时，通过 MC 循环基本可以减小误差的繁衍和传递，但是如果演变时间较长时，虚拟颗粒的尺度差异越来越大，虚拟颗粒的数目权值越来越大，将扩大和传递这种误差，这种

误差可称为"常数目误差",是 MMC 算法为了同时保持常数目和常体积所付出的代价。另外,两种事件驱动 MC 方法中,由于常数目法在每次事件之后均需要采用随机过程来恢复模拟颗粒数目,对系统的扰动频率高于阶梯式常体积法,其计算精度要相对差一些,而且常数目法需要更多的随机取样过程,所耗费的计算代价也要稍多一些,这与文献[38]的分析结果一致。常数目法中由于数目恢复过程所产生的误差也归纳为"常数目误差"。

另外,这些 MC 方法由于需要大量的随机过程而均存在随机算法所固有的随机误差,这种误差与随机取样次数或 MC 循环次数紧密相关。随机取样次数或 MC 循环次数越多,随机误差越小,这种误差对四种 MC 方法计算精度的影响程度相同,且对于本节所采用的三次 MC 循环求平均值的方法而言,随机误差并非 MC 方法的主要影响因素。

最后,以上四种 MC 方法均存在固有的统计误差,统计误差与模拟颗粒数目的平方根成反比,在模拟颗粒数目达到 $O(10^3)$量级之后,这个误差对 N 和 M 等宏观参数或整体参数的影响并不明显,这也是为什么阶梯式常体积法(其模拟颗粒数目在 $N_{s0}/2\sim N_{s0}$之间波动,N_{s0}为初始模拟颗粒数目)的模拟结果优于常数目法(其模拟颗粒数目始终保持为 N_{s0})的原因之一;而对于特定时刻的颗粒尺度分布这种细观参数而言,如果是颗粒尺度谱范围较广的多分散性颗粒群,模拟颗粒数目对颗粒尺度分布的精度影响较大,因为对于离散系统而言,必须保证每个颗粒类内模拟颗粒数目达到一定量级[如 $O(10^2)$以上],才可保证颗粒尺度分布的统计精度,通过增加虚拟颗粒数目可减少这种误差。

四种 MC 方法对于颗粒尺度分布函数的描述精度在同一级别。对于颗粒尺度分布函数这种细观参数而言,模拟颗粒数目是影响计算精度的最重要因素,四种 MC 方法均能够把模拟颗粒数目控制在一个适当的范围之内,始终保持模拟颗粒数目达到 $O(10^3)$的量级,所以它们对于颗粒尺度分布函数的描述精度相差不大,且随着时间的推移,几种 MC 方法的颗粒尺度分布函数整体方差 $\sigma_d(t)$趋于收敛。值得注意的是,MMC 算法能够更精确地描述颗粒尺度谱高端部分的动力学演变过程,这是由于 MMC 算法引入了加权虚拟颗粒概念,不同的虚拟颗粒具有不同的数目权值,数目较少而尺度较大的颗粒类仍然能够被一些数目权值较小的虚拟颗粒所代表,而引入子系统概念的三种 MC 方法中,每颗模拟颗粒具有相同的数目权值,使得那些数目较少而尺度较大的颗粒类不能被任何模拟颗粒所代表,从而丢失了这些颗粒类动力学演变过程的信息。

(2) 计算代价。

四种 MC 方法之间计算代价的差异由于以下几种原因引起:

① 时间驱动 MC 方法的低效率。通常来说,由于时间驱动 MC 方法需要明确的时间窗口离散而比事件驱动 MC 方法低效。一方面,在一个时间步长内可能没

有任何动力学事件发生；另外一方面，时间驱动 MC 方法为了尽量避免“解耦误差”而引入乘积常数 α 来增加 MC 循环的次数，这将增大时间驱动 MC 方法的计算代价。但是也有例外的情况，对于常凝并核，时间驱动 DSMC 方法的计算代价比事件驱动 MC 方法的计算代价都要小。这是因为常凝并核工况时每颗颗粒具有相同的凝并概率，故在一个时间步长内平均发生的凝并事件数目为模拟颗粒数目和乘积常数的乘积（$N_{s0}\times\alpha$），对于 Case1 的实际计算条件，$N_{s0}\times\alpha=10$，所以此时时间驱动 MC 方法比事件驱动 MC 效率更高一些。

② 模拟颗粒数目的差异。时间驱动 DSMC 方法和阶梯式常体积法中模拟颗粒数目在 $N_{s0}/2\sim N_{s0}$之间，而常数目法和 MMC 算法的模拟颗粒数目始终保持在 N_{s0}，对于凝并事件的处理，由于四种 MC 方法在每次 MC 循环中均需要对所有颗粒进行二重循环，故模拟颗粒数目的减少将大大有利于计算代价的减少。

③ 累积概率法和接受-拒绝法的计算效率的差异。累积概率法精确描述了颗粒动力学事件，但需要在每次事件之后通过二重循环来计算总凝并概率而计算代价较大，特别是模拟颗粒数目较多时。而接受-拒绝法的计算代价通常较小一些，但是如果颗粒尺度分布范围较宽，导致随机产生的颗粒的凝并核与最大凝并核的比值很小，因此大量拒绝动作的产生将极大地降低接受-拒绝法的计算效率。

④ 数目恢复过程所消耗的计算代价的差异。常数目法需要比阶梯式常体积法更多的随机过程来恢复模拟颗粒总数目，故消耗的计算代价也更大一些。

⑤ MMC 算法中强制保持常体积和常数目的计算代价。MMC 算法的时间步长不仅与颗粒凝并核有关，而且与颗粒的数目权值有关，某些工况下（如 Case2 和 Case3）时间步长很小，降低了 MC 方法的计算效率，这是 MMC 算法强制保持常体积和常数目所付出的代价，可以把 MMC 算法看作是一种“时间换空间”的算法。

总的说来，对于凝并的描述，如果只需要获取尺度分布的时间演变过程，事件驱动 MC 方法要比时间驱动 MC 方法更精确和更经济，而其中又以阶梯式常体积法更为合适。

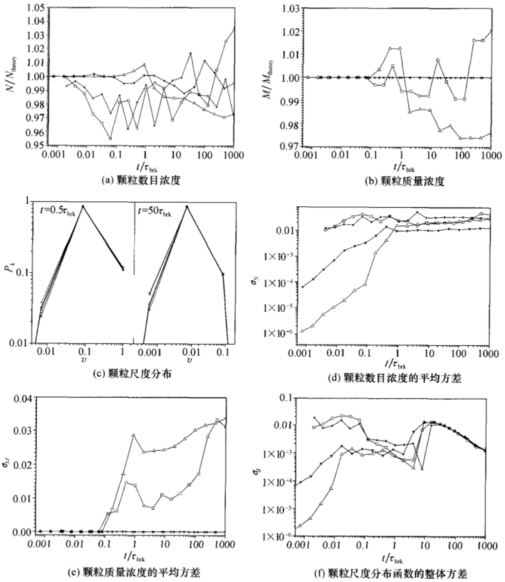
4.5.2 纯破碎工况

对于破碎、冷凝/蒸发、沉积等单颗粒动力学事件的处理，MC 方法要比欧拉方法更为简单，这是因为这些事件的发生只涉及一颗已存在的颗粒。

1）Case4，指数阶破碎核工况

为了检验 MC 算法对于复杂破碎问题的描述，本节选择指数阶破碎速率、多元破碎工况，其中 $S(v)=v^{1.8}$，$b(u)=12$，$\gamma(u,v)=\delta(v,u/12)$，子颗粒等尺度分布，初始颗粒数目为 $N_0=3000\mathrm{m}^{-3}$，颗粒特征破碎时间尺度定义为 $\tau_{\mathrm{brk}}=1/S(v_0)=1/(v_0{}^{1.8})$。由于每次破碎事件均产生 12 颗碎片，即增加 11 颗颗粒，故实际颗粒数目急剧增加，时间驱动 DSMC、阶梯式常体积法和常数目法中子系统体积随之相

应减小，而 MMC 算法中模拟颗粒的数目权值不断增加。具体计算条件参照表 4.4，结果如图 4.21 所示。



(a) 颗粒数目浓度 (b) 颗粒质量浓度

(c) 颗粒尺度分布 (d) 颗粒数目浓度的平均方差

(e) 颗粒质量浓度的平均方差 (f) 颗粒尺度分布函数的整体方差

图 4.21 Case4，指数阶破碎速率和多元破碎

—— 理论分析解；-△- 阶梯式常体积法；-▼- 常数目法；-□- 时间驱动 DSMC 方法；-•- MMC 算法

2）分析

由模拟结果的比较可知，常数目 MC 方法（常数目法和 MMC 算法）的模拟结

果的计算精度整体上要好于阶梯式常数目 MC 方法(阶梯式常体积法和时间驱动 DSMC 方法),且计算代价要更低一些。两种常数目 MC 方法严格保持颗粒总质量浓度不变,而两种阶梯式常数目 MC 方法中 M 的相对误差在 3%范围内;两种常数目 MC 方法中 N 的相对误差在 2%范围内,而两种阶梯式常数目 MC 方法的误差在 4%范围内。阶梯式常数目 MC 方法计算精度较低的原因在于:由于每次破碎事件增加 11 颗颗粒,当模拟颗粒数目超过初始颗粒数目的两倍时,需要通过随机过程抛弃一半模拟颗粒数目并倍减子系统时,将对整体系统产生一定程度的扰动,导致一定的误差。另外一方面,模拟颗粒数目并不一定恰恰等于初始模拟颗粒数目的一半,此时需要额外再抛弃若干模拟颗粒,以使得新的子系统内模拟颗粒数目恢复初始数目,这将产生一定误差。这种误差是阶梯式的,参见图 4.21(b)中颗粒质量浓度的曲线。可以通过选择恰当的虚拟颗粒初始数目来在某些情况下避免这种误差。例如,如果一次事件对虚拟颗粒数目的改变数值为 z,则可以选择初始虚拟颗粒数目为 $N_{f0}=i\times|z|$,i 为事件发生次数,此时每次倍增或倍减动作之前虚拟颗粒实时数目将恰好等于 $N_{f0}/2$ 或 $2N_{f0}$。但是,即使如此,"阶梯式常数目方案"仍然会带来一定程度的数值误差。当处理过多的虚拟颗粒数目时,随机抛弃一半虚拟颗粒的措施将对颗粒群的各种状态参数产生扰动,只有当虚拟颗粒数目足够多时,随机抛弃一半虚拟颗粒之后剩余的颗粒虚拟的各种状态参数才能与原始颗粒群的状态参数在统计上具有相同意义。这个阶梯式恢复虚拟颗粒数目的过程所产生的误差即为"阶梯式误差"。

对于颗粒尺度分布函数的描述,几种 MC 方法的计算精度基本在同一水平,且随着时间的推移而趋向于收敛在一起,这进一步证明,几种 MC 方法对于颗粒尺度分布函数的计算精度主要取决于模拟颗粒数目,均能够达到较高的模拟精度。

常数目 MC 方法计算效率较高的原因在于其所跟踪的模拟颗粒数目(即 N_{s0})总是小于等于阶梯式常数目 MC 方法所跟踪的模拟颗粒数目(即 $N_{s0}\sim 2N_{s0}$)。

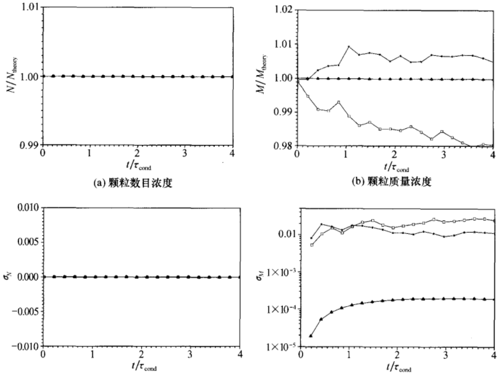
总体而言,对于多元破碎工况的描述以常数目 MC 方法(即常数目法和 MMC 算法)更为合适,而对于通常所考虑的二元破碎而言,以上几种 MC 方法均表现良好。

4.5.3　纯冷凝/蒸发(或生长)工况

1) Case5,线性冷凝核工况

四种 MC 方法对于常冷凝核工况均表现优异,本节选择线性凝并核工况,此时冷凝单体的数目浓度为 $C_{sur0}=1.0\times10^{10}\,m^{-3}$,冷凝单体与尺度为 v 的实际颗粒发生作用(类似于冷凝单体与实际颗粒的凝并)的速率为 $D_{sur}(v)=1.0\times10^{-10}v\,m^3\cdot s$,初始颗粒数目浓度为 $N_0=10^{10}\,m^{-3}$,认为冷凝过程中冷凝单体的数目浓度始终不变。定义冷凝特征时间长度为 $\tau_{cond}=1/[C_{sur0}D_{sur}(v_0)]$。颗粒数目

浓度的理论分析解为 $N_{\text{theory}}(t)=N_0$，颗粒质量浓度的理论分析解为 $M_{\text{theory}}(t)=N_0v_0\exp(-t/\tau_{\text{cond}})$。具体计算条件参照表 4.4，结果如图 4.22 所示。对于初始单分散性颗粒群，冷凝事件发生的过程中颗粒尺度分布依然近似地保持单分散性分布，这里只给出 N 和 M 的计算结果。



(a) 颗粒数目浓度　(b) 颗粒质量浓度

(c) 颗粒数目浓度的平均方差　(d) 颗粒质量浓度的平均方差

图 4.22　Case5，线性冷凝核工况

—▲—阶梯式常体积法；—•—常数目法；—▫—时间驱动 DSMC 方法；—·— MMC 算法

2）分析

对冷凝过程的描述，事件驱动 MC 方法要好于时间驱动 MC 方法，两种事件驱动 MC 方法均能精确描述冷凝过程，而时间驱动 MC 方法对于 M 的相对误差在 2%范围内。四种 MC 方法的高计算精度主要是因为冷凝/蒸发事件并不影响模拟颗粒数目。时间驱动 MC 方法中 M 的精度低于事件驱动 MC 方法的原因在于时间驱动 MC 方法自身的“解耦误差”。因为在一个时间步长内可能有多个冷凝事件发生，这些冷凝事件之间可能并不能完全解耦，同一时间步长内发生的事件越多，就越容易造成误差，减小 α 增多 MC 循环的次数或者取多次模拟结果的平均值可以增加时间驱动 MC 方法的计算精度，如图 4.22(b)和(d)中所示，$\alpha=0.001$ 的

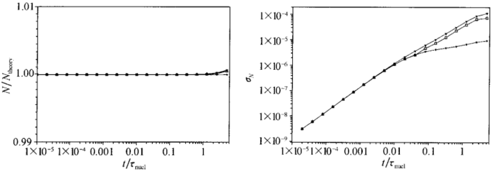
MMC 算法的模拟结果，就要整体上好于$\alpha=0.01$ 时时间驱动 DSMC 方法的模拟结果。

总之，事件驱动 MC 方法对冷凝/蒸发（表面生长/消融）的描述要好于时间驱动 MC。

4.5.4 纯成核工况

1) Case6，一阶成核核

本工况中初始核体数目为 $N_0=3000\mathrm{m}^{-3}$，前驱体初始数目浓度为 $C_{\mathrm{pre}}(0)=10^5\mathrm{m}^{-3}$，成核速率为 $K_{\mathrm{nucl}}=5.0\times10^{-6}\mathrm{s}^{-1}$，$V_sJ(t)\delta(v_{\min},v)=K_{\mathrm{nucl}}C_{\mathrm{pre}}(t)=-\mathrm{d}C_{\mathrm{pre}}(t)/\mathrm{d}t$，前驱体和核体尺度均为 $v_{\mathrm{pre}}=v_0=1$（无量纲）。定义特征成核时间尺度为 $\tau_{\mathrm{nucl}}=1/K_{\mathrm{nucl}}$。颗粒数目浓度的理论分析解为 $N_{\mathrm{theory}}(t)=N_0+C_{\mathrm{pre}}(0)[1-\exp(-t/\tau_{\mathrm{nucl}})]$，颗粒质量浓度的理论分析解为 $V_{\mathrm{theory}}(t)=N_0v_0+C_{\mathrm{pre}}(0)v_{\mathrm{pre}}[1-\exp(-t/\tau_{\mathrm{nucl}})]$。由于本算例中颗粒尺度分布始终满足单分散性分布，故颗粒数目浓度和颗粒质量浓度随时间的演变规律完全一致，这里只给出颗粒数目浓度的曲线。具体计算条件参照表 4.4，结果如图 4.23 所示。



(a) 颗粒数目浓度

(b) 颗粒数目浓度的平均方差

图 4.23 Case6，一阶成核核工况

-▵-阶梯式常体积法； -·-常数目法； -▫-时间驱动 DSMC 方法； -·- MMC 算法

2) 分析

四种 MC 方法均能高精度地描述纯成核过程中颗粒数目浓度等的时间变化规律，其中 MMC 算法相对而言计算精度更高一些，主要原因在于所跟踪的计算区域的差异。MMC 算法跟踪整体系统，而其他三种 MC 方法跟踪的是一个从整体系统内取样的子系统。在采用子系统概念的 MC 方法中，当子系统内一颗新的模拟颗粒产生时，意味着整体系统内 V/V_s 颗实际颗粒产生，其中 V 为整体系统体积，V_s 为子系统体积，在起始阶段，$V=V_s$，而随着子系统内模拟颗粒数目的增多，子系统体积被收缩以恢复其内模拟颗粒数目，使得 $V>V_s$，所以一个模拟颗粒的产

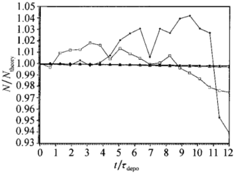
生意味着多颗实际颗粒的产生，故这些 MC 方法无法直接模拟每一个实际的成核事件。而在 MMC 算法中，由于以整体系统为模拟对象，其内发生的每一个实际的成核事件均被跟踪到，数值精度更高一些。

计算代价的差异是因为：常数目法较阶梯式常体积法和时间驱动 MC 方法省时是因为其模拟颗粒数目总是 3000，子系统体积不断增大而使得计算区域中两个事件之间的时间间隔的增长速率更快，而后者的模拟颗粒数目在 3000～6000 之间。MMC 算法计算区域体积不变，直接模拟每一个成核事件，所以计算代价最大。

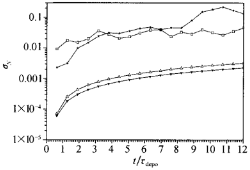
4.5.5 纯沉积工况

1）Case7，重力沉积核工况

这种工况中，悬浮颗粒由于重力作用而沉积下来，此时沉积核 $R(v)=K_{\text{depo}}v^{2/3}$，本算例中取 $K_{\text{depo}}=10^{-5}\,\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$，初始颗粒数目浓度为 $N_0=10^{10}\,\text{m}^{-3}$，定义颗粒沉积特征时间尺度为 $\tau_{\text{depo}}=1/R(v_0)=1/(K_{\text{depo}}v_0^{\,2/3})$。颗粒数目浓度的理论分析解为 $N_{\text{theory}}(t)=N_0\exp(-t/\tau_{\text{depo}})$，颗粒质量浓度的理论分析解为 $V_{\text{theory}}(t)=N_0v_0\exp(-t/\tau_{\text{depo}})$。本算例中颗粒数目浓度和颗粒质量浓度随时间的演变规律完全一致，这里只给出颗粒数目浓度的曲线。具体计算条件参照表 4.4，结果如图 4.24 所示。



(a) 颗粒数目浓度



(b) 颗粒数目浓度的平均方差

图 4.24 Case7，重力沉积核工况

-▵-阶梯式常体积法； -▾-常数目法； -▫-时间驱动 DSMC 方法； -·- MMC 算法

2）分析

显然，事件驱动 MC 方法，无论是常数目法还是阶梯式常体积法，均更高精度地描述了颗粒沉积过程，而时间驱动 MC 方法则存在一定的误差。这种误差的原因仍然可归结为时间驱动 MC 方法自身的“解耦误差”，即在一个时间步长内可能发生的多个沉积事件之间并不能完全解耦。减少 α 可以降低一个时间步长内的事

件数目，故能有效减少时间驱动 MC 方法的误差，如图 4.24 中 $\alpha=0.00033$ 的时间驱动 DSMC 方法的精算精度高于 $\alpha=0.001$ 的 MMC 算法的计算精度。对于 MMC 算法而言，其误差的另外一个原因是，由于需要强制保持常计算区域内固定的模拟颗粒数目，每次沉积事件的发生都将对虚拟颗粒的数目权值产生扰动，时间越长，扰动越大，这导致 MMC 算法的误差越大，增加虚拟颗粒数目可以有效降低 MMC 算法的误差。阶梯式常数目 MC 方法（阶梯式常体积法和时间驱动 DSMC）比常数目 MC 方法（常数目法和 MMC 算法）更省时的原因是前者模拟颗粒数目在 1500～3000 之间，而后者模拟颗粒数目总是 3000。

综合来看，事件驱动 MC 方法对沉积过程的描述更精确而且更省时。

4.5.6 讨论

综合四种 MC 方法对纯凝并、纯破碎、纯冷凝/蒸发（表面生长）、纯成核、纯沉积等动力学事件的描述，可以得到如下结论：

（1）事件驱动 MC 方法的计算精度和计算效率整体而言高于时间驱动 MC 方法，这主要归因于时间驱动 MC 方法本身所固有的“解耦误差”和低效率。时间驱动 MC 方法中，一个时间步长内同时发生的多个动力学事件并不能完全解耦（特别是对于凝并事件而言，时间驱动 MC 方法中同一颗颗粒之间可能发生多重行为，同时参与多个凝并事件），造成了时间驱动 MC 方法的误差。这种误差也可以通过对成核过程的模拟来验证，时间驱动 MC 方法的每个时间步长内有且仅有一个颗粒由于成核而产生，所以对其的模拟精度与事件驱动 MC 方法相当。

（2）两种事件驱动 MC 方法的性能基本在同一水平，两种时间驱动 MC 方法的性能也在同一层次。

（3）四种 MC 方法均能较为精确地描述颗粒尺度分布函数的时间演变过程，其计算精度主要取决于模拟颗粒数目，四种 MC 方法均能保持模拟颗粒数目在 $N_{s0}/2\sim 2N_{s0}$（对于两种阶梯式常数目 MC 方法）或 N_{s0}（对于两种常数目 MC 方法），当初始模拟颗粒数目达到 $O(10^3)$ 时，四种 MC 方法对于 PSDF 的描述精度在同一水平，且随着时间推移而逐渐收敛在一起。

（4）每种 MC 方法对于各种动力学事件的描述均有若干误差来源，总结如表 4.5 所示。对于时间驱动 MC 方法（时间驱动 DSMC 方法和 MMC 算法）而言，“解耦误差”是最主要的误差来源之一；对于阶梯式常数目 MC 方法（时间驱动 DSMC 方法和阶梯式常体积法）而言，“阶梯式误差”是最主要的误差来源之一；对于常数目 MC 方法（常数目法和 MMC 算法）而言，强制保持常数目的过程，即实时地通过调整子系统体积（对于常数目法而言）或模拟颗粒数目权值（对于 MMC 算法而言）来恢复模拟颗粒数目的过程，将产生一定程度的数值误差，而且因为对系统的扰动频率大于阶梯式常数目 MC 方法，其“常数目误差”通常大于“阶梯式误差”；采用

累积概率法或接受-拒绝法实现事件驱动 MC 方法并不影响其计算精度。

表 4.5 各种 MC 方法的数值误差

误差类型	时间驱动 DSMC 方法	常数目法	阶梯式常体积法	MMC 算法
解耦误差	√	—	—	√
阶梯式误差	√	—	√	—
常数目误差	—	√	—	√
统计误差	√	√	√	√
随机误差	√	√	√	√

(5) 诸多因素影响各种 MC 方法描述各种动力学事件时的计算代价，总结如表 4.6 所示。对于时间驱动 MC 方法而言，为了尽可能减少“解耦误差”而设置较小的乘积因子 α 以增加 MC 循环的次数，将导致时间驱动 MC 方法的低效率；阶梯式常数目 MC 方法的计算代价明显受各种动力学机理控制下模拟颗粒数目变动的影响；累积概率法或接受-拒绝法的采用对事件驱动 MC 方法的计算代价有影响，影响程度取决于具体模拟工况，通常而言接受-拒绝法的计算代价更低一些。强制保持模拟颗粒数目的过程将对 MC 方法计算代价产生贡献，实时保持常数目的过程将比阶梯式保持常数目的过程消耗更多的计算代价。

表 4.6 各种 MC 方法的计算代价的影响因素

因 素	时间驱动 DSMC 方法	常数目法	阶梯式常体积法	MMC 算法
时间驱动 MC 方法的低效率	√	—	—	√
模拟颗粒数目差异	√	√	√	√
累积概率法和接受-拒绝法的效率	—	√	√	—
模拟颗粒数目恢复过程	√	√	√	√

(6) 对于特定时刻颗粒尺度分布函数而言，采用加权虚拟颗粒概念的 MC 方法(MMC 算法)对于那些数目较小的颗粒类的动力学演变过程的描述精度高于采用子系统概念的 MC 方法(时间驱动 DSMC 方法、阶梯式常体积法和常数目法)，原因在于：采用子系统概念的 MC 方法中每颗模拟颗粒具有相同的数目权值，当某个尺度的颗粒的数目小于平均数目权值时，将没有任何模拟颗粒来代表这些颗粒类，而 MMC 算法可以通过数目权值较小的虚拟颗粒来代表那些颗粒数目较少的颗粒类。

4.6 多重 Monte Carlo 算法的改进

4.6.1 算法改进的出发点

通过把 MMC 算法与几种主流 MC 方法进行定量比较发现，MMC 算法本身

存在一定程度的数值误差。限于 MMC 算法本身基于时间驱动模式的特点,"解耦误差"只能通过调整乘积因子 α 来尽可能地避免,而无法达到事件驱动 MC 方法对于"解耦误差"的免疫。鉴于时间驱动 MC 方法对两相湍流模型的友好性,它仍然是一种不可舍弃的基础框架;随机误差和统计误差也是随机算法所无法避免的,随机误差可以通过多次 MC 循环得到一定程度的缓解,而增加模拟数目则可以一定程度上减少统计误差的影响。在 MMC 算法中减少以上三种误差,均是以增加计算消耗为代价的,需要根据具体情况进行相应的计算策略调整以实现计算精度和计算代价的折中。但是,对于 MMC 算法的"常数目误差",则是由于 MMC 算法对于各种动力学事件的处理与实际过程存在一定偏差所致。例如,在对颗粒凝并事件的后果进行处理时,MMC 算法采取的措施是把参与凝并的两颗虚拟颗粒的数目权值各自减半,且体积均变为两颗虚拟颗粒凝并之前的体积之和,这些措施不一定完全符合实际的凝并过程,特别是无法严格保持凝并前后颗粒总质量浓度不变,但是可以强制保持计算区域体积和计算区域内虚拟颗粒数目不变。

实际上,MMC 算法中虚拟颗粒数目权值并不完全相等,即采用了"异数目权值虚拟颗粒群策略",但是原始 MMC 算法对凝并等事件的后果处理只适合于"等数目权值虚拟颗粒群策略"的情况。另外,从几种 MC 方法的定量比较可以得到如下认识:模拟过程中并不需要强制保持恒定的模拟颗粒数目,当模拟颗粒数目控制在一定范围之内时(如阶梯式常数目 MC 方法中模拟颗粒数目在 $N_{s0}/2 \sim 2N_{s0}$ 之间波动),无论是对于颗粒数目浓度和质量浓度等宏观统计量,还是对于颗粒尺度分布函数等细观统计量,均能达到较高的计算精度,而强制保持常数目将使得常数目 MC 方法(常数目法和 MMC 算法)具有比"阶梯式误差"更严重的"常数目误差"。

最后,应该强调的是,以整体系统而非"子系统"为模拟对象、"常体积"特征是引入网格划分技术而进行三维空间扩展和多维颗粒群平衡模拟的必须保证,而把模拟颗粒数目控制在一定范围之内也是保持较高的颗粒尺度分布函数计算精度的主要保证。鉴于此,本节在保持已发展的多重 Monte Carlo 算法多项优点的基础上,通过改进 MMC 算法、在一定程度上避免或抑制这种"常数目误差",以期达到更高的计算精度和计算效率。

改进的 MMC 算法(the improved multi-Monte Carlo method,IMMC 算法)仍然基于时间驱动技术,引入加权虚拟颗粒的概念,通过计算最小的动力学事件时间尺度来设置恰当的时间步长,并在该时间步长内跟踪所有的虚拟颗粒,利用标准的 Markov 过程来判断每颗虚拟颗粒是否发生某种动力学,并通过调整参与动力学事件的主颗粒的数目权值和尺度来体现动力学事件对于颗粒尺度分布的影响。不同之处在于对各种动力学事件的描述,4.6.2 节～4.6.5 节将详细说明。对各种动力学事件进行描述的过程中,不仅仅体现该事件对于颗粒尺度分布的影响,还注意

保持动力学事件发生前后系统的质量、动量和能量守恒。因为冷凝/蒸发(表面生长/表面沉积)事件对虚拟颗粒总数目并不改变,MMC 算法对其进行描述时也并不存在"常数目误差",所以不需要对这种事件的描述方法进行改进。

4.6.2 改进的多重 Monte Carlo 算法对凝并事件的描述

1)"异数目权值虚拟颗粒凝并准则"的建立和凝并总概率的计算

MMC 算法对于颗粒凝并事件的描述较差,主要原因在于其无法严格保持颗粒中总质量浓度(颗粒尺度分布的一阶矩)不变,而实际过程中凝并事件并不改变颗粒质量浓度。其主要原因在于:对于参与凝并事件的两颗虚拟颗粒,MMC 算法认为这两颗虚拟颗粒所代表的每一颗实际颗粒均参与了凝并事件。当两虚拟颗粒(以虚拟颗粒 i 和 j 为例)的数目权值相等时,即 $w_i=w_j$ 时,这种处理方法不存在问题,MMC 算法此时能够保持凝并前后颗粒总质量浓度不变。但是当 $w_i\neq w_j$ 时(假设 $w_i>w_j$),实际上虚拟颗粒 i 所代表的 w_i 颗实际颗粒中,只有 $\min(w_i,w_j)=w_j$ 颗实际颗粒与虚拟颗粒 j 所代表的 w_j 颗实际颗粒发生了对应的二元凝并事件,虚拟颗粒 i 所代表的每颗实际颗粒发生凝并的概率为 $\min(w_i,w_j)/w_i=w_j/w_i<100\%$,而虚拟颗粒 j 所代表的每颗实际颗粒发生凝并的概率为 $\min(w_i,w_j)/w_j=100\%$。这种情况下,MMC 算法的对于凝并事件的处理存在一定问题,并不符合实际的物理过程,也无法严格保持颗粒尺度的一阶矩。如果参与凝并事件的两虚拟颗粒的数目权值和尺度之间的差异较小,通过多次 MC 循环并取平均值的办法可以有效抑制这种误差的传播和繁殖。

改进的 MMC 算法与原始 MMC 算法的最大不同之处在于凝并总概率 C_i 的计算。在原始 MMC 算法中,单位体积内虚拟颗粒 i 发生凝并事件的总概率为

$$C_i=\frac{1}{V_s^2}\sum_{j=1,i\neq j}^{N_f}\beta_{ij}w_j \tag{4.42}$$

C_i 的计算是基于如下凝并准则(以下称为"等数目权值虚拟颗粒凝并准则"):参与凝并事件的虚拟颗粒 i 和其凝并伙伴 j 所代表的每一颗实际颗粒均具有 100%的概率参与一次实际凝并过程。如上所分析,如果虚拟颗粒 i 和 j 的数目权值不相等,MMC 算法的处理方案无法严格地保持凝并前后的质量、动量和能量守恒,存在一定程度的误差。在改进的 MMC 算法中,重新建立了一个新的凝并准则(以下称为"异数目权值虚拟颗粒凝并准则"),认为虚拟颗粒 i 和 j 所代表的实际颗粒之间最多可能发生 $\min(w_i,w_j)$ 次实际的颗粒凝并事件,也就是说,虚拟颗粒 i 中的每颗实际颗粒只可能与虚拟颗粒 j 中的 $\min(w_i,w_j)$ 颗实际颗粒存在发生凝并事件的可能,反之亦然。这种虚拟凝并准则将有利于在凝并过程中保持质量、动量和能量守恒,本节"凝并事件的后果处理"部分将详述。在这种虚拟凝并准则中,

相应地需要对 C_i的计算准则进行改变。

在“等数目权值虚拟颗粒凝并准则”中，如果已经确定虚拟颗粒 i 和 j 发生凝并事件，则虚拟颗粒 i 所代表的每颗实际颗粒可能与虚拟颗粒 j 所代表的 w_j 颗实际颗粒中的任何一颗发生一次实际凝并事件，同样，虚拟颗粒 j 所代表的每颗实际颗粒可能与虚拟颗粒 i 所代表的 w_i 颗实际颗粒中的任何一颗发生一次凝并事件，所以虚拟颗粒 i 和 j 中每颗实际颗粒可能与之相互作用的颗粒数目的平均值为

$$\bar{c}_r = \frac{w_i w_j + w_i w_j}{w_i + w_j} = \frac{2w_i w_j}{w_i + w_j} \tag{4.43}$$

如果 $w_i = w_j = w$，则 $\bar{c}_r = w$。

而在“异数目权值虚拟颗粒凝并准则”中，虚拟颗粒 i 和 j 所代表的每颗实际颗粒可能与 $\min(w_i, w_j)$颗实际颗粒中的任何一颗发生一次实际凝并事件，所以每颗实际颗粒可能与之相互作用的颗粒的数目的平均值 c_r'也为 $\min(w_i, w_j)$。在两种凝并准则中，平均每颗实际颗粒的凝并概率相等，即

$$\frac{c_r'}{\Delta t'} = \frac{c_r}{\Delta t}, \quad 或者 \quad \frac{\min(w_i, w_j)}{\Delta t'} = \frac{\dfrac{2w_i w_j}{w_i + w_j}}{\Delta t} \tag{4.44}$$

式中：Δt 和 $\Delta t'$分别为“等数目权值虚拟颗粒凝并准则”和“异数目权值虚拟颗粒凝并准则”中发生一次凝并事件所消耗的时间长度。于是

$$\Delta t' = \frac{(w_i + w_j)\min(w_i, w_j)}{2w_i w_j} \Delta t \leqslant \Delta t \tag{4.45}$$

所以，在“异数目权值虚拟颗粒凝并准则”中虚拟颗粒 i 和 j 之间单位时间单位体积内凝并次数 $N'_{c,ij}$ 和“等数目权值虚拟颗粒凝并准则”中的 $N_{c,ij}$[见公式(4.3)]存在如下关系：

$$N_{c,ij} V_s \Delta t = N'_{c,ij} V_s \Delta t' \tag{4.46}$$

即

$$N'_{c,ij} = \frac{\beta_{ij} w_i w_j \dfrac{2w_i w_j}{(w_i + w_j)\min(w_i, w_j)}}{V_s^2} \tag{4.47}$$

同样地，在“异数目权值虚拟颗粒凝并准则”中，单位时间单位体积内虚拟颗粒 i 所代表的所有实际颗粒所发生的凝并事件的总次数 $N'_{c,i}$为

$$N'_{c,i} = \sum_{j=1, j\neq i}^{N_f} N'_{c,ij} = \frac{1}{V_s^2} \sum_{j=1, j\neq i}^{N_f} \beta_{ij} w_i w_j \frac{2w_i w_j}{(w_i + w_j)\min(w_i, w_j)} \tag{4.48}$$

在“异数目权值虚拟颗粒凝并准则”中，虚拟颗粒 i 发生凝并事件的总概率 C_i'为

$$C_i' = \frac{N'_{c,i}}{w_i} = \frac{1}{V_s^2} \sum_{j=1, i\neq j}^{N_f} \beta_{ij} w_j \frac{2w_i w_j}{(w_i + w_j)\min(w_i, w_j)} \tag{4.49}$$

如果 $w_i=w_j$，则 $C_i'=C_i$；也就是说，"等数目权值虚拟颗粒凝并准则"是"异数目权值虚拟颗粒凝并准则"的特例。

在改进的 MMC 算法中，虚拟颗粒 i 的凝并时间尺度 $t'_{i,\mathrm{coag}}$ 为

$$t'_{i,\mathrm{coag}}=\frac{1}{V_sC_i'}=\frac{V_s}{\sum\limits_{j=1,i\neq j}^{N_f}\beta_{ij}w_j\dfrac{2w_iw_j}{(w_i+w_j)\min(w_i,w_j)}}=\frac{V_s}{\sum\limits_{j=1,i\neq j}^{N_f}\dfrac{2\beta_{ij}w_j\max(w_i,w_j)}{w_i+w_j}} \tag{4.50}$$

值得注意的是，如果虚拟颗粒数目权值不相等，

$$\sum_{j=1,i\neq j}^{N_f}\frac{2\beta_{ij}w_j\max(w_i,w_j)}{w_i+w_j}\neq 4\sum_{j=1,j=i+1}^{N_f}\frac{\beta_{ij}w_j\max(w_i,w_j)}{w_i+w_j} \tag{4.51}$$

所以在"异数目权值虚拟颗粒凝并准则"中，为了计算每颗虚拟颗粒的凝并事件尺度，所耗费的计算代价为 $O(N_f^2)$，而不是时间驱动 DSMC 方法中的 $O(N_f^2/2)$。

2）是否发生凝并事件的判断

认为颗粒凝并所导致的动力学演变过程为 Markov 过程[1]。由于一次凝并事件涉及两颗颗粒，在 MMC 算法中，不管某颗虚拟颗粒是以主颗粒（跟踪颗粒）还是以凝并伙伴的身份参与凝并事件，均被检测到参与了一次凝并事件，所以实际上同一个凝并事件将被检测到两次，这种处理方法不便于保持凝并前后颗粒质量、动量和能量守恒。在改进的 MMC 算法中，一次凝并事件只可能被检测到一次，即只检测到某颗虚拟颗粒以主颗粒的身份（即该颗虚拟颗粒为当前所跟踪的那颗虚拟颗粒）参与的那次凝并事件。所以在 Δt 内发生一次虚拟颗粒 i 参与的凝并事件的概率满足如下指数分布，即 $Pr_{\mathrm{coag},i}(\Delta t)=1-\exp(-V_sC_i'\Delta t/2)\approx V_sC_i'\Delta t/2$。利用随机算法来考虑颗粒是否凝并以及寻找其凝并伙伴。首先生成满足均匀分布、位于 [0,1] 的随机数 r_1，如果随机数 r_1 小于等于 $Pr_{\mathrm{coag},i}(\Delta t)$，那么虚拟颗粒 i 将确定要发生一次凝并事件。

3）凝并伙伴的选择

改进的 MMC 算法中虚拟颗粒 i 和某个颗粒 j 发生凝并事件的概率 P_{ij} 如下计算：

$$P_{ij}=\frac{\beta_{ij}w_j\dfrac{2w_iw_j}{(w_i+w_j)\min(w_i,w_j)}}{\sum\limits_{k=1,k\neq i}^{N_f}\beta_{ik}w_k\dfrac{2w_iw_k}{(w_i+w_k)\min(w_i,w_k)}}=\frac{\beta_{ij}w_j\dfrac{2w_iw_j}{(w_i+w_j)\min(w_i,w_j)}}{C_i'V_s^2} \tag{4.52}$$

然后通过满足均匀分布、位于[0,1]的另外一个随机数 r_2 来判断与虚拟颗粒 i 发生凝并的伙伴颗粒 j，如果以下关系得到满足，则认为虚拟颗粒 j 为 i 的凝并伙伴。

$$\sum_{k=1}^{j-1} P_{ik} \leqslant r_2 \leqslant \sum_{k=1}^{j} P_{ik} \quad j \in [1, N_f] \tag{4.53}$$

实际上，无论是对于时间驱动 MC 方法还是事件驱动 MC 方法，离散动力学事件的发生均满足标准的 Markov 过程，有两种标准算法可以实现标准 Markov 过程，即累积概率法和接受-拒绝法，通常时间驱动 MC 方法均采用累积概率法来选择凝并伙伴。累积概率法的优点是精确描述了离散的凝并事件的发生概率，但是模拟颗粒数目较多时计算代价将较大，我们借鉴事件驱动 MC 算法中通常采用的接受-拒绝法，在时间驱动 MC 算法中首次发展接受-拒绝法来实现凝并伙伴的选择。首先随机选择一颗不同于主颗粒 i 的虚拟颗粒 j，如果如下关系得到满足：

$$r \leqslant \frac{\beta_{ij} w_j \dfrac{2w_i w_j}{(w_i + w_j)\min(w_i, w_j)}}{\max\limits_{\forall k, \forall m}\left\{\beta_{km} w_k \dfrac{2w_k w_m}{(w_k + w_m)\min(w_k, w_m)}\right\}} \tag{4.54}$$

则认为虚拟颗粒 j 将与主颗粒 i 发生凝并事件。如果颗粒之间的凝并核差异不大，接受-拒绝法具有高计算效率。而对于凝并核差异较大的工况，大量的拒绝事件可能反而降低该方法的效率。累积概率法和接受-拒绝法可以依据具体工况切换使用。

4）凝并事件的后果处理

（1）“异数目权值虚拟颗粒凝并准则”。

改进的 MMC 算法中，虽然仍然对所有虚拟颗粒进行遍历以判断当前跟踪的虚拟颗粒是否发生凝并事件，但是一次凝并事件只可能被检测到一次，因此对凝并事件的后果进行处理时，需要同时涉及主颗粒 i 和伙伴颗粒 j，即同时调整 i 和 j 的数目权值和尺度。在“异数目权值虚拟颗粒凝并准则”中，虚拟颗粒 i 所代表的实际颗粒与虚拟颗粒 j 所代表的实际颗粒之间发生实际凝并事件的次数为 $\min(w_i, w_j)$，虚拟颗粒 i 和 j 中分别只有 $\min(w_i, w_j)$ 颗实际颗粒两两配对发生了凝并事件，并非所有实际颗粒均参与凝并事件。所以“异数目权值虚拟颗粒凝并准则”中，在主颗粒 i 和伙伴颗粒 j 的凝并事件之后，将存在两类实际颗粒：参与了凝并事件而新生成的实际颗粒和未参与凝并事件的已存在的实际颗粒。这两类实际颗粒分别重新被虚拟颗粒 i 和 j 所代表，物理过程如图 4.25 所示。此时虚拟颗粒 i 和 j 均被保持下来，但是其数目权值 w、尺度 v 和速度 $\boldsymbol{u}$ 均需要相应地进行调整，如下所示：

① 当 $(w_i)_{\text{old}} = (w_j)_{\text{old}}$ 时，

$$
\begin{cases}
(w_i)_{\text{new}} = \dfrac{1}{2}(w_i)_{\text{old}} \\
(v_i)_{\text{new}} = (v_i)_{\text{old}} + (v_j)_{\text{old}} \\
(\boldsymbol{u}_i)_{\text{new}} = \dfrac{(\boldsymbol{u}_i)_{\text{old}}(v_i)_{\text{old}} + (\boldsymbol{u}_j)_{\text{old}}(v_j)_{\text{old}}}{(v_i)_{\text{old}} + (v_j)_{\text{old}}} \\
(w_j)_{\text{new}} = \dfrac{1}{2}(w_j)_{\text{old}} \\
(v_j)_{\text{new}} = (v_i)_{\text{old}} + (v_j)_{\text{old}} \\
(\boldsymbol{u}_j)_{\text{new}} = \dfrac{(\boldsymbol{u}_i)_{\text{old}}(v_i)_{\text{old}} + (\boldsymbol{u}_j)_{\text{old}}(v_j)_{\text{old}}}{(v_i)_{\text{old}} + (v_j)_{\text{old}}}
\end{cases}
$$

② 当$(w_i)_{\text{old}} > (w_j)_{\text{old}}$时，

$$
\begin{cases}
(w_i)_{\text{new}} = (w_i)_{\text{old}} - (w_j)_{\text{old}} \\
(v_i)_{\text{new}} = (v_i)_{\text{old}} \\
(\boldsymbol{u}_i)_{\text{new}} = (\boldsymbol{u}_i)_{\text{old}} \\
(w_j)_{\text{new}} = (w_j)_{\text{old}} \\
(v_j)_{\text{new}} = (v_i)_{\text{old}} + (v_j)_{\text{old}} \\
(\boldsymbol{u}_j)_{\text{new}} = \dfrac{(\boldsymbol{u}_i)_{\text{old}}(v_i)_{\text{old}} + (\boldsymbol{u}_j)_{\text{old}}(v_j)_{\text{old}}}{(v_i)_{\text{old}} + (v_j)_{\text{old}}}
\end{cases}
$$

③ 当$(w_i)_{\text{old}} < (w_j)_{\text{old}}$时，

$$
\begin{cases}
(w_i)_{\text{new}} = (w_i)_{\text{old}} \\
(v_i)_{\text{new}} = (v_i)_{\text{old}} + (v_j)_{\text{old}} \\
(\boldsymbol{u}_i)_{\text{new}} = \dfrac{(\boldsymbol{u}_i)_{\text{old}}(v_i)_{\text{old}} + (\boldsymbol{u}_j)_{\text{old}}(v_j)_{\text{old}}}{(v_i)_{\text{old}} + (v_j)_{\text{old}}} \\
(w_j)_{\text{new}} = (w_j)_{\text{old}} - (w_i)_{\text{old}} \\
(v_j)_{\text{new}} = (v_j)_{\text{old}} \\
(\boldsymbol{u}_j)_{\text{new}} = (\boldsymbol{u}_j)_{\text{old}}
\end{cases}
\tag{4.55}
$$

很显然，这种处理方式严格保持了凝并前后的质量和动量守恒，且虚拟颗粒总数目在凝并事件前后保持不变。

注意到，当采用“异数目权值虚拟颗粒凝并准则”时，虚拟颗粒总数目始终保持恒定，也就是说，随着凝并事件的进行，该算法自动恢复虚拟颗粒数目，所以称这种虚拟颗粒数目恢复方案为“常数目方案”。

(2)“等数目权值虚拟颗粒凝并准则”。

在 4.5 节中进行了几种主流 MC 方法的定量比较，发现在 MMC 算法中，“常数目误差”的一个重要贡献是虚拟颗粒数目权值的扰动，因此尽量避免动力学演变

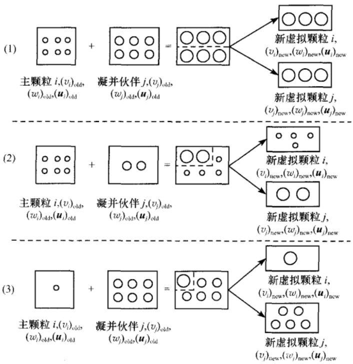


图 4.25 “异数目权值虚拟颗粒凝并准则”中两虚拟颗粒凝并过程示意图

过程中虚拟颗粒数目权值的扰动将有利于提高这类 MC 方法的数值精度。基于此认识，应该尽量保持 MC 方法模拟过程中虚拟颗粒数目权值的不变。在某些工况中，如初始单分散性颗粒群或某些离散分布的初始多分散性颗粒群，初始时刻所有虚拟颗粒的数目权值可以设置为相等。对于这种等数目权值虚拟颗粒群的凝并工况，如果不存在其他动力学事件对于虚拟颗粒数目权值的扰动，采用如下措施来处理两颗具有相等数目权值的虚拟颗粒的凝并后果：当前跟踪的虚拟颗粒 i 的数目权值不变，而尺度更新为两参与凝并事件的虚拟颗粒 i 和 j 的尺度之和，凝并事件发生之后的主颗粒速度按照动量守恒定律计算，虚拟颗粒 i 的凝并伙伴 j 则被抛弃，一次凝并事件之后虚拟颗粒总数目减 1，即

$$\begin{cases} (w_i)_{new} = (w_i)_{old} = (w_j)_{old} = w \\ (v_i)_{new} = (v_i)_{old} + (v_j)_{old} \\ (\boldsymbol{u}_i)_{new} = \dfrac{(\boldsymbol{u}_i)_{old}(v_i)_{old} + (\boldsymbol{u}_j)_{old}(v_j)_{old}}{(v_i)_{old} + (v_j)_{old}} \end{cases} \tag{4.56}$$

式中：w 为虚拟颗粒群的公共数目权值。

这种凝并事件的处理过程如图 4.26 所示。

此时，随着凝并事件的不断发生，虚拟颗粒总数目将不断减少，借鉴阶梯式常

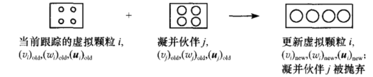


图 4.26 “等数目权值权值虚拟颗粒凝并准则”中两虚拟颗粒凝并过程示意图

数目 MC 方法对于过少模拟颗粒的处理方法，当虚拟颗粒总数目减少到初始总数目的一半（$N_{f0}/2$）时，把现存的所有虚拟颗粒逐一复制一份，把复制的这些虚拟颗粒加入原有虚拟颗粒序列，使得虚拟颗粒总数目恢复到 N_{f0}，并把所有这些虚拟颗粒的数目权值减半，而尺度和速度等属性均不变。这种倍减虚拟颗粒数目权值的方案在统计意义上能够保持数目恢复过程中的质量守恒、动量守恒和能量守恒等。这种虚拟颗粒数目恢复方案称为“阶梯式常数目方案”。

4.6.3 改进的多重 Monte Carlo 算法对破碎事件的描述

破碎、冷凝/蒸发、沉积等事件只涉及一颗主颗粒，同样可以认为这些事件的发生满足标准的 Markov 过程，即虚拟颗粒 i 在 Δt 内发生某个事件的概率满足指数分布。改进的多重 Monte Carlo 算法对于某颗当前跟踪的虚拟颗粒是否发生破碎、冷凝/蒸发、沉积等事件的随机判断与原始的 MMC 算法一样，不在此重复描述，其不同之处在于对这些事件的后果处理，即恢复虚拟颗粒数目、保持常体积及符合动力学规律（质量、动量和能量守恒）的过程。

随着破碎事件的进行，过多的虚拟颗粒数目将加剧 MC 方法的计算代价，此时必须采取措施来减少模拟颗粒数目。原始的 MMC 算法把每颗新增的虚拟颗粒分别与已有的尺度最接近的虚拟颗粒合并，从而始终保持恒定的虚拟颗粒数目。这种处理方式对于零维空间系统中颗粒尺度分布时间演变过程的描述没有问题，但是如果需要描述尺度分布的空间扩散时，由于需要耦合颗粒速度场等信息，所以数目恢复过程必须满足动量守恒准则，而原始 MMC 算法所采用的这种“合并策略”无法满足动量守恒。在改进的 MMC 算法中，借鉴阶梯式常数目 MC 方法对于过多模拟颗粒的处理方法，即采用“阶梯式常数目方案”。破碎事件所产生的新颗粒依次填入虚拟颗粒数列，不对其进行合并处理，并在下一个时间步长之内跟踪所有这些虚拟颗粒，此时虚拟颗粒总数目将不断增加。当虚拟颗粒数目总数目 N_f 等于或超过初始时刻虚拟颗粒数目的两倍，即 $2N_{f0}$（其中 N_{f0} 为初始虚拟颗粒数目）时，随机抛弃（N_f-N_{f0}）颗虚拟颗粒，使得虚拟颗粒数目恢复到 N_{f0}，并把这剩下的 N_{f0} 颗虚拟颗粒的数目权值均各自增倍，而尺度和速度等属性均不变。在这种倍增虚拟颗粒数目权值的方案中，如果虚拟颗粒数目足够多，数目恢复过程之前及之后，虚拟颗粒群的速度场等属性在统计上具有相同的属性，也就是说，这种方

案在统计意义上能够保持数目恢复过程中的质量守恒、动量守恒和能量守恒。

4.6.4 改进的多重 Monte Carlo 算法对沉积事件的描述

在原始 MMC 算法中，为了应对沉积事件所导致的虚拟颗粒总数目减少的情况，随机选择一颗虚拟颗粒 i 并把其分裂为两颗等数目权值的虚拟颗粒，把这两颗虚拟颗粒分别取代虚拟颗粒 i 和已判定将要沉积的虚拟颗粒的位置，以达到常数目的目的。这种处理方式能够保持质量、动量和能量守恒准则。但是，每次沉积事件的处理都需要对虚拟颗粒的数目权值产生一定程度的扰动，这种扰动将使得 MMC 算法产生一定的误差。类似于"等数目权值虚拟颗粒凝并准则"中采用的恢复虚拟颗粒数目的方法，这里采用"阶梯式常数目方案"来处理过少虚拟颗粒：发生沉积事件的虚拟颗粒被抛弃，在下一个时间步长之内只跟踪剩余的虚拟颗粒，当虚拟颗粒总数目减少到初始总数目的一半时，保持计算区域体积不变，而倍减所有虚拟颗粒的数目权值，详细过程参照"等数目权值虚拟颗粒凝并准则"中的"阶梯式常数目方案"。

4.6.5 改进的多重 Monte Carlo 算法对成核事件的描述

随着成核事件的发生，虚拟颗粒总数目将越来越大，不采用原始 MMC 算法中虚拟颗粒合并的办法，而采用倍增虚拟颗粒数目权值而恢复虚拟颗粒数目的策略，即"阶梯式常数目方案"，这与破碎过程处理过多的虚拟颗粒数目的手段完全相同。

4.7 改进的多重 Monte Carlo 算法的验证和比较

改进 MMC 算法(IMMC)与原始 MMC 算法的主要不同点在于对凝并事件的描述方法，从虚拟颗粒凝并准则的建立、凝并事件的判断、凝并伙伴的寻找到凝并事件的后果处理，均存在相当的差异，本节重点验证 IMMC 算法对于凝并事件的描述精度；另外对于破碎、成核、沉积等事件的描述上，IMMC 算法与原始 MMC 算法的不同之处在于处理过多或过少虚拟颗粒数目的策略。IMMC 算法虽然仍然保持常体积，但是实际上并不严格保持恒定的虚拟颗粒数目，而是阶梯式地保持虚拟颗粒数目，虚拟颗粒总数目在初始虚拟颗粒数目的一半和两倍之间波动，从这种意义上来说，IMMC 算法属于时间驱动 MC 方法、常体积法和阶梯式常数目 MC 方法。本节把 IMMC 算法的模拟结果与原始 MMC 算法模拟结果、理论分析解和其他主流 MC 方法模拟结果进行定量比较，验证其对于凝并等事件的描述精度，并从比较中探讨 IMMC 算法的误差源和计算消耗。

在第 2 章和本章中，MMC 算法和其他随机算法对于具有各种各样动力学事件核模型的工况进行了详细的数值比较和验证，可知，随机算法的数值精度与动力学事件核模型的类别并无直接的关系。所以本节中，当需要验证 IMMC 算法对于

某种动力学事件的描述精度时，只选取一种核模型进行数值计算。

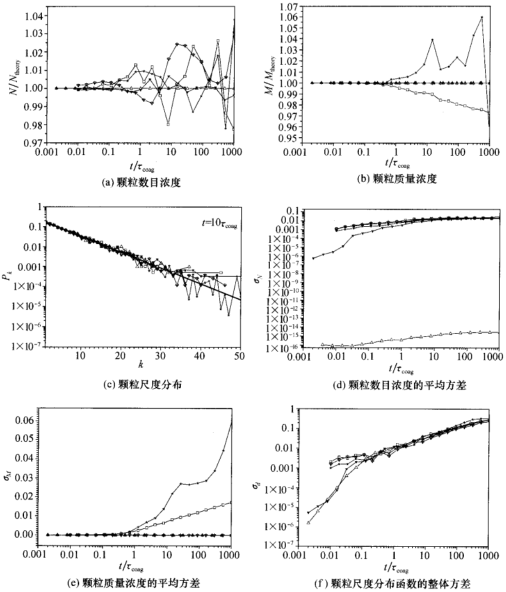
对凝并事件的模拟结果进行数值比较和验证是重点。需要考察 IMMC 算法对于凝并总概率的计算、凝并事件的判断、凝并伙伴的寻找、凝并后果的处理等部分是否合理。这里选择初始单分散性颗粒群的常凝并核工况和初始指数分布多分散性颗粒群的常凝并核工况作为数值模拟工况。相比较于原始 MMC 算法而言，IMMC 算法对于破碎、成核和沉积事件的描述方案的差异仅仅在于恢复虚拟颗粒数目的策略。在破碎和成核工况中，IMMC 算法均采用同样的倍增虚拟颗粒数目权值的策略来恢复虚拟颗粒数目，在沉积工况和采用"阶梯式常数目方案"的凝并工况中，IMMC 算法均采用同样的倍减虚拟颗粒数目权值以恢复虚拟颗粒数目的策略，3.2 节中大量的数值试验已经证明这种阶梯式恢复模拟颗粒数目的方案具有足够好的性能，在此不再专门计算、比较和验证。另外，IMMC 算法对于冷凝/蒸发的描述与原始 MMC 算法没有差异，不再针对这种动力学事件进行数值模拟。

4.7.1 Case1，初始单分散性颗粒群，常凝并核

这种工况可以单独考察 IMMC 算法中凝并事件的判断、凝并伙伴的寻找、凝并后果的处理等方案是否符合实际过程。

采用"异数目权值虚拟颗粒凝并准则"的 IMMC 算法更为通用，首先把其与阶梯式常体积法、常数目法、时间驱动 DSMC 方法和原始 MMC 算法进行定量比较，其中 IMMC 算法采用累积概率法实现。计算条件与 4.5.1 节中 Case1 完全相同，IMMC 算法中乘积因子 α 为 0.01，初始虚拟颗粒数目为 1000。计算结果如图 4.27 所示。

从图 4.27(a)可知，相比较于 MMC 算法，IMMC 算法对于颗粒数目浓度 N 的描述精度有所提高(从 MMC 算法的相对误差 4%提高到 IMMC 算法的相对误差 3%)，且精确描述了颗粒质量浓度 M 的时间演变，而 MMC 算法对于 M 的相对误差甚至达到了 6%[如图 4.27(b)所示]。整体而言，IMMC 算法对 N 的描述精度与其他时间驱动 MC 方法(时间驱动 DSMC 方法和 MMC 算法)相比并无明显改变[如图 4.27(d)所示]，均明显小于事件驱动 MC 方法对 N 的描述精度，显然，这是由于时间驱动 MC 方法所固有的"解耦误差"减弱了模拟精度的缘故；但是 IMMC 算法对 M 的描述精度达到了事件驱动 MC 方法的水平[如图 4.27(e)所示]，远远高于其他时间驱动 MC 方法的描述精度。对于颗粒尺度分布函数的时间演变过程的描述，所有 MC 方法的性能相似，几种 MC 方法的 σ_d(颗粒尺度分布函数的整体方差)随着时间推移而逐渐收敛在一起[如图 4.27(f)所示]，且均能较高精度地描述特定时刻颗粒尺度分布函数[如图 4.27(c)所示]；值得注意的是，IMMC 算法仍然保持了 MMC 算法对颗粒尺度谱高端部分的描述精度，这同样归因于 IMMC 算法采用异数目权值虚拟颗粒来代表这些颗粒数目较少的颗粒类的缘故。



(a) 颗粒数目浓度　(b) 颗粒质量浓度　(c) 颗粒尺度分布　(d) 颗粒数目浓度的平均方差　(e) 颗粒质量浓度的平均方差　(f) 颗粒尺度分布函数的整体方差

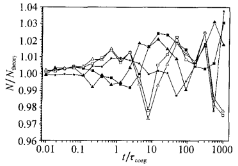
图 4.27　几种 MC 的定量比较(初始单分散性颗粒群，常凝并核)

——理论分析解；-△-阶梯式常体积法；-▾-常数目法；-□-时间驱动 DSMC 方法；-·- MMC 算法；-▾-改进的 MMC 算法

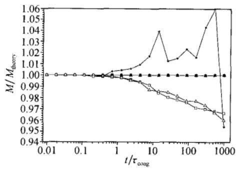
这种计算条件下 IMMC 算法所消耗的 CPU 时间为 82.91s，计算代价高于 MMC 算法的原因在于："异数目权值虚拟颗粒凝并准则"中，虚拟颗粒i 的凝并事件尺度 $t'_{i,\text{coag}}$小于采用"等数目权值虚拟颗粒凝并准则"的 MMC 算法中的 $t_{i,\text{coag}}$，从

而导致时间步长 Δt 更小，离散的时间窗口更多，计算代价增大。

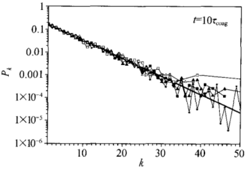
在描述凝并事件时，IMMC 算法存在两种恢复虚拟颗粒数目的方案，一种是“异数目权值虚拟颗粒凝并准则”中所描述的自动保持恒定虚拟颗粒数目的方案（“常数目方案”），另一种是“等数目权值虚拟颗粒凝并准则”中所描述的倍减虚拟颗粒数目权值以阶梯式恢复虚拟颗粒数目的方案（“阶梯式常数目方案”）。分别采用这两种虚拟颗粒数目恢复方案来实现 IMMC 算法。在这种初始单分散性颗粒群工况中，初始时刻虚拟颗粒数目权值均相等，“阶梯式常数目方案”对虚拟颗粒数目权值无扰动。另外，IMMC 算法也存在两种方法，即累积概率法和接受-拒绝法来实现凝并伙伴的选择，分别采用这两种方法来实现 IMMC 算法。四种 IMMC 算法如下标记：IMMC(A)算法采用“异数目权值虚拟颗粒凝并准则”、“常数目方案”和累积概率法实现，IMMC(B)算法采用“等数目权值虚拟颗粒凝并准则”、“阶梯式常数目方案”和累积概率法实现，IMMC(C)算法采用“异数目权值虚拟颗粒凝并准则”、“常数目方案”和接受-拒绝法实现，IMMC(D)算法采用“等数目权值虚拟颗粒凝并准则”、“阶梯式常数目方案”和接受-拒绝法实现，四种 IMMC 算法的模拟结果与 MMC 算法模拟结果放在一起进行定量比较，如图 4.28 所示，所消耗的 CPU 时间如表 4.7 所示。



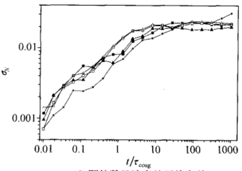
(a) 颗粒数目浓度



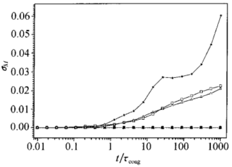
(b) 颗粒质量浓度



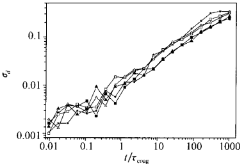
(c) 颗粒尺度分布



(d) 颗粒数目浓度的平均方差



(e) 颗粒质量浓度的平均方差



(f) 颗粒尺度分布函数的整体方差

图 4.28 几种 IMMC 算法实现方案的比较

——理论分析解；—·— MMC 算法；—▪— IMMC(A)算法；—▫— IMMC(B)算法；
—▴— IMMC(C)算法；—◦— IMMC(D)算法

表 4.7 IMMC 算法的计算代价

算法类型	MMC	IMMC(A)	IMMC(B)	IMMC(C)	IMMC(D)
T_{cpu}/s	13.01	82.91	24.66	81.45	24.86

首先考察 IMMC 算法采用“异数目权值虚拟颗粒凝并准则”(或者说“常数目方案”)和“等数目权值虚拟颗粒凝并准则”(或者说“阶梯式常数目方案”)时的性能差异。分别比较 IMMC(A)算法和 IMMC(B)算法、IIMC(C)算法和 IMMC(D)算法的模拟结果,可以发现如下现象：采用“常数目方案”的 IMMC 算法对于颗粒数目浓度 N 和颗粒尺度分布函数的模拟结果均稍稍高于采用“阶梯式常数目方案”的 IMMC 算法,但是基本仍在同一描述精度的层次上；采用“常数目方案”的 IMMC 算法对于颗粒数目浓度 M 的描述精度明显高于采用“阶梯式常数目方案”的 IMMC 算法；采用“常数目方案”的 IMMC 算法能够更为精确地描述颗粒尺度谱的高端部分；采用“常数目方案”的 IMMC 算法的计算代价明显高于采用“阶梯式常数目方案”的 IMMC 算法。计算精度的差异可以如下解释：采用“常数目方案”的 IMMC 算法由于虚拟颗粒数目权值的扰动存在所谓的“常数目误差”,而采用“阶梯式常数目方案”的 IMMC 算法由于阶梯式恢复虚拟颗粒数目而存在所谓的“阶梯式误差”,在常凝并核工况中,两种误差对 N 和颗粒尺度分布函数等模拟结果的影响程度基本相同；但是采用“常数目方案”的 IMMC 算法精确保持凝并过程中 M 不变,而采用“阶梯式常数目方案”的 IMMC 算法存在明显的“阶梯式误差”。两种方案中计算代价的差异主要来源于模拟颗粒数目的差异。

IMMC(C)算法和 IMMC(D)算法均为采用接受-拒绝法的 IMMC 算法,由图 4.28 可知,这两种 IMMC 算法高精度地模拟了凝并过程,证明在时间驱动 MC 中采用接受-拒绝法同样能够精确描述颗粒凝并过程。通过定量比较 IMMC(A)

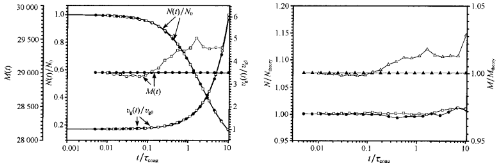
算法和IMMC(C)算法、IIMC(B)算法和 IMMC(D)算法的模拟结果，可以考察 IMMC 算法采用累积概率法或接受-拒绝法对计算精度和计算效率的影响。比较发现：采用何种方法实现凝并伙伴的选择对计算精度和计算效率没有明显影响。

几种 IMMC 算法的计算精度均高于原始的 MMC 算法，但是计算效率均低于 MMC 算法。计算代价较大的原因是：IMMC 算法中，时间窗口以更小的区间被离散，从而增加了 MC 方法的计算消耗。

4.7.2　Case2，初始指数分布多分散性颗粒群，常凝并核

这种工况中，初始时刻颗粒尺度分布函数参照公式(4.30)，其中，颗粒平均尺度 $v_{g0}=0.029\mu m^3$，初始颗粒数目浓度 $N_0=10^6 cm^{-3}$。IMMC 算法采用“异数目权值虚拟颗粒凝并准则”、“常数目方案”和累积概率法实现。IMMC 算法和 MMC 算法的初始虚拟颗粒数目均为 3000，乘积因子 $\alpha=0.01$，两种算法均按照对数分类法则在 $10^{-5}\sim 1\mu m^3$ 的区间把颗粒尺度谱分为 200 类，两种算法均基于“异数目权值虚拟颗粒群策略”，设定每个颗粒类至少由 10 个虚拟颗粒所代表，所以实际跟踪的虚拟颗粒数目为 4040。这种工况主要检测两种算法对于初始多分散性颗粒群的描述性能，模拟结果如图 4.29 所示。

由图 4.29 可知，虽然两种 MC 方法均较高精度地描述了颗粒尺度分布函数的各阶矩（N、M 和 v_g 等）、特定时刻颗粒尺度分布函数等，但是 IMMC 算法严格保持颗粒质量浓度不变，对于特定时刻颗粒尺度分布函数，IMMC 算法的模拟结果与理论值的差异更小，以更小的频率围绕理论分析解脉动，证明 IMMC 算法对于初始多分散性工况具有更高的计算精度。

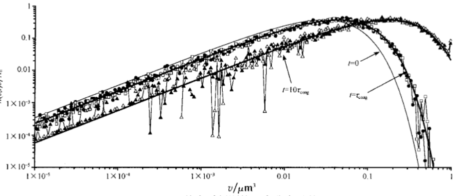


(a) 颗粒数目浓度N、颗粒质量浓度M和颗粒几何平均尺度v_g与理论分析解的比较

——理论分析解；　-•-IMMC算法；　-▫-MMC算法

(b) N和M的相对误差

-•- IMMC算法, N/N_{theory}；　-▫-MMC算法, N/N_{theory}；
-▴- IMMC算法, M/M_{theory}；　-▵-MMC算法, M/M_{theory}；



(c) 特定时刻颗粒尺度分布函数

—— 初始PSD；　—— 理论分析解；　-•- IMMC算法, $t=\tau_{coag}$；
-▫- MMC算法, $t=\tau_{coag}$；　-▴- IMMC算法, $t=10\tau_{coag}$；　-▵- MMC算法, $t=10\tau_{coag}$

图 4.29　IMMC 算法和 MMC 算法模拟结果(初始指数分布多分散性颗粒群,常凝并核)

4.8　改进的多重 Monte Carlo 算法小结

通过几种 MC 方法的定量比较发现,原始 MMC 算法还存在提高计算精度和计算效率的空间,为此针对原始 MMC 算法所表现出的“常数目误差”,我们对其进行了改进:针对凝并事件,建立起一种“异数目权值虚拟颗粒凝并准则”,把原始 MMC 算法所基于的“等数目权值虚拟颗粒凝并准则”作为其一种特例,改进了虚拟颗粒总凝并概率的计算,并改进了凝并事件的判断、凝并伙伴的寻找和凝并事件的后果处理;首次在时间驱动 MC 方法模式中采用接受-拒绝法来选择凝并伙伴,是对传统的累积概率法的一种重要补充,在不同的工况中两种方法具有各自独特的优点。累积概率法由于需要对所有模拟颗粒的二重遍历而具有固定且较高的计算代价,接受-拒绝法则在颗粒尺度谱较窄或各种尺度的颗粒凝并核较为接近时具有较高的计算效率;改进的 MMC 算法还针对凝并事件发展了自动保持虚拟颗粒恒定数目的“常数目方案”和阶梯式恢复虚拟颗粒数目的“阶梯式常数目方案”;另外,对于破碎、成核和沉积事件对虚拟颗粒数目的扰动,改进的 MMC 算法也发展“阶梯式常数目方案”来恢复虚拟颗粒数目,即当虚拟颗粒数目等于或超越初始数值的两倍或一半时,随机抛弃一半虚拟颗粒或复制现有虚拟颗粒,并采用倍增或倍减虚拟颗粒数目权值的方法来恢复虚拟颗粒总数目,不仅保持了常体积的特征,而且尽量避免了对虚拟颗粒数目权值的扰动而在一定程度上减少了 MMC 算法所具有的“常数目误差”。

特别针对凝并事件的处理,对于初始单分散性或多分散性颗粒群的凝并工况,把改进的 MMC 算法与原始 MMC 算法、时间驱动 DSMC 算法、阶梯式常体积法、

常数目法等进行了定量比较，发现：改进的 MMC 算法在颗粒数目浓度 N 的计算精度方面比原始的 MMC 算法有一定改进，且优于时间驱动 DSMC 算法；它能够严格保持凝并过程中颗粒总质量浓度 M 不变，符合实际物理过程，达到了事件驱动 MC 方法对 M 的计算精度；它仍然保持了 MMC 算法的主要优点，即对较少颗粒数目的颗粒类的动力学演变过程具有比其他 MC 方法更高的精度，常体积特征等；改进的 MMC 算法比原始 MMC 算法的计算效率有所下降，主要原因在于“异数目权值虚拟颗粒凝并准则”中时间窗口以更小的区间被离散；改进的 MMC 算法对于各种动力学事件的后果进行处理不仅符合质量守恒原则，还符合动量守恒和能量守恒定律，这有利于其进行多维颗粒群平衡模拟。

从某种意义来说，改进的多重 Monte Carlo 算法也是一种新的颗粒群平衡模拟随机方法，它的两大特色是基于时间驱动和常体积，因此，我们在之后的研究中，也在某些场合把其命名为时间驱动常体积法(time-driven constant volume method，TDCV)，以便与下面介绍的事件驱动常体积法(event-driven constant volume method，EDCV)对照起来。

4.9　事件驱动常体积法的发展

4.9.1　发展事件驱动常体积法的出发点

前面较为完整地介绍了描述颗粒尺度分布时间演变过程的多重 Monte Carlo 算法(包括原始的 MMC 算法和改进的 MMC 算法，以下统称为 MMC 算法)，并对其进行了较为全面的验证和比较分析。通过与其他几种类型的 MC 方法进行定量比较，可以取得如下认识：①整体而言，事件驱动 MC 方法比时间驱动 MC 方法具有更高的计算精度和计算效率，这是因为事件驱动 MC 方法天生就避免了时间驱动 MC 方法所固有的解耦假设和“解耦误差”的缘故；②严格保持常数目和常体积是以算法计算精度和计算效率的降低为代价的，这是因为恢复虚拟颗粒数目和保持计算区域的过程中将对模拟颗粒群产生一定程度的人为扰动，从而引入了数值误差，扰动程度越小。扰动次数越少，数值误差也越小。相对来说，阶梯式恢复虚拟颗粒数目的方法(时间驱动 DSMC 方法和阶梯式常体积法所采用的倍增或倍减子系统的办法，改进的 MMC 算法所采用的倍增或倍减数目权值的办法，即“阶梯式常数目方案”)比连续式恢复虚拟颗粒数目的方法(MMC 算法采用的调整虚拟颗粒数目权值的方法，常数目法中采用的实时调整计算区域的方法，即“常数目法方案”)对颗粒尺度分布的各阶矩(颗粒总数目浓度和总质量浓度等)的计算精度影响更小一些；③MC 方法对于颗粒尺度分布函数的描述精度主要取决于模拟颗粒数目，当模拟颗粒数目达到 $O(10^3)$ 量级

时，在同样的初始模拟颗粒数目的条件下，尽管模拟过程中几种 MC 方法的模拟颗粒数目并不完全相等，但是几种 MC 方法均具有几乎同样的颗粒尺度分布函数时间演变过程的描述精度；④如果需要描述颗粒尺度分布的时间和空间演变，则 MC 方法必须抛弃“子系统”概念且必须保持常体积特征，因为子系统概念本身就是基于颗粒尺度分布空间各向同性的假设，而常体积的特征便于与网格划分技术耦合起来，也便于考虑系统边界等；⑤采用加权虚拟颗粒概念的 MC 方法（MMC 算法）对于那些数目较小的颗粒类的动力学演变过程的描述精度高于采用子系统概念的 MC 方法（时间驱动 DSMC 方法、阶梯式常体积法和常数目法）。这几点结论可以指导随机算法的发展或改进。

多重 Monte Carlo 算法及其改进算法已经尽可能在时间驱动模式下达到了高计算精度，但是相比较于事件驱动 MC 方法，其计算精度和计算效率仍有不及之处。所以如果仅仅描述颗粒尺度分布的时间演变过程，事件驱动 MC 方法是一种重要的方法。目前几种基于事件驱动的 MC 方法都存在各自的优缺点。Matsoukas 等发展的常数目法[2,24,36]实时且连续地保持恒定的虚拟颗粒数目，计算精度和计算效率均存在可提升的空间；Maisels 等发展的阶梯式常体积法[30,38]通过倍减计算区域体积的办法处理过多模拟颗粒数目时表现出较大的数目恢复误差，原因在于随机抛弃一定数量的模拟颗粒可能对虚拟颗粒群的统计属性产生了扰动，且在某些工况（如多元破碎工况）中，倍减子系统体积时模拟颗粒数目并不恰恰等于初始数目的两倍，此时需要采用随机抛弃或增加虚拟颗粒的办法来强制恢复虚拟颗粒数目，也将产生一定程度的数值误差；Kraft 等[39]发展的事件驱动强核函数法的计算代价仅仅只随模拟颗粒数目而线性增长（常规 MC 方法中计算代价与模拟颗粒数目的平方成正比），但是计算精度通常要更低一些，且对于不同的核模型需要发展不同的强函数核模型，算法较为复杂且适用范围也有一定局限性。另外，这些事件驱动 MC 共同的缺点仍然是引入子系统的概念和通过调整计算区域来恢复模拟颗粒数目。

正是如此，我们发展了一种新的基于事件驱动 MC 方法，该算法用于描述颗粒尺度分布的时间演变过程。该算法仍然借鉴 MMC 算法的优点，即引入加权虚拟颗粒概念和在演变过程中保持计算区域体积不变的特点。该算法被命名为事件驱动常体积法，下面对其进行详细的介绍。

4.9.2 动力学事件的发生速率

在事件驱动 MC 方法中，必须首先计算动力学事件的速率，以便于之后计算两个动力学事件之间的等待时间（静止时间）和选择主事件和主颗粒。根据虚拟颗粒数目权值的不同，在不同的虚拟颗粒数目权值赋值策略中，破碎、沉积、成核、冷凝/蒸发等事件的发生速率的计算表达式相同（因为这些事件不涉及两颗主颗粒），

但是凝并事件速率的计算表达式存在较大差异，下面针对"等数目权值虚拟颗粒群策略"（公共数目权值 $w=1$ 与 $w\neq1$ 两种情况）和"异数目权值虚拟颗粒群策略"（$w_i\neq w_j$）三种不同情况，从特殊情况到普通情况，一一详细阐述如下。

1）等数目权值虚拟颗粒群，$w=1$

这种情况意味着 MC 方法实际上跟踪计算区域 V_s 内的每一颗颗粒。那些引入子系统概念的 MC 方法，如时间驱动 DSMC、常数目法和阶梯式常体积法，就属于这种情况。单位体积内的动力学事件速率 R_l（单位为 $s^{-1}\cdot m^{-3}$）如表 4.8 所示。

2）等数目权值虚拟颗粒群，$w\neq1$

原始的 MMC 算法已经建立了等数目权值虚拟颗粒凝并准则，在这种准则下，虚拟颗粒 i 的单位体积总凝并概率 $C_i(s^{-1}\cdot m^{-3})$为

$$C_i=\frac{1}{V_s^2}\sum_{j=1,i\neq j}^{N_f}\beta_{ij}w_j \tag{4.57}$$

所以，这种凝并准则下单位体积凝并速率如下计算：

$$R_{coag}=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N_f}C_i=\frac{1}{2V_s^2}\sum_{i=1}^{N_f}\sum_{j=1,i\neq j}^{N_f}\beta_{ij}w_j \tag{4.58}$$

式中分母中的"2"是为了考虑到对虚拟颗粒进行二重遍历过程中同一凝并对被统计了两次。在"等数目权值虚拟颗粒群策略"中，由于任何一颗虚拟颗粒的数目权值均等于 w，所以式(4.58)可以简化为

$$R_{coag}=\frac{1}{V_s^2}\sum_{i=1}^{N_f}\sum_{j=i+1}^{N_f}\beta_{ij}w=\frac{w}{V_s^2}\sum_{i=1}^{N_f}\sum_{j=i+1}^{N_f}\beta_{ij} \tag{4.59}$$

很显然，公式(4.59)是公式(4.58)的特例。

3）异数目权值虚拟颗粒群

改进的 MMC 算法建立了"异数目权值虚拟颗粒凝并准则"，此时，虚拟颗粒 i 与虚拟颗粒 j 之间发生的实际颗粒凝并事件次数为 $\min(w_i,w_j)$，虚拟颗粒 i 所代表的每颗实际颗粒发生凝并事件的概率为 $\min(w_i,w_j)/w_i$，而虚拟颗粒 j 所代表的每颗实际颗粒发生凝并事件的概率为 $\min(w_i,w_j)/w_j$。在这种凝并准则的控制下，虚拟颗粒 i 单位体积内发生一次凝并事件的概率为

$$C_i'=\frac{1}{V_s^2}\sum_{j=1,i\neq j}^{N_f}\beta_{ij}w_j\frac{2w_iw_j}{(w_i+w_j)\min(w_i,w_j)} \tag{4.60}$$

因此单位体积内凝并事件的发生速率为

$$R_{coag}=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N_f}C_i'=\frac{1}{2V_s^2}\sum_{i=1}^{N_f}\sum_{j=1,j\neq i}^{N_f}\beta_{ij}w_j\frac{2w_iw_j}{(w_i+w_j)\min(w_i,w_j)}=\frac{1}{V_s^2}\sum_{i=1}^{N_f}T_i \tag{4.61}$$

表 4.8　动力学事件的发生速率

事件类型	$R_l/(\mathrm{s}^{-1}\cdot\mathrm{m}^{-3})$			
	连续表达式	离散表达式		
		等数目权值，$w=1$	等数目权值，$w\neq1$	异数目权值
凝并	$\frac{1}{2}\int_{v_{\min}}^{v_{\max}}\int_{v_{\min}}^{v_{\max}}\beta(u,v)n(u)n(v)\mathrm{d}u\mathrm{d}v$	$\frac{1}{V_s^2}\sum_{i=1}^{N_f}\sum_{j=i+1}^{N_f}\beta_{ij}$	$\frac{w}{V_s^2}\sum_{i=1}^{N_f}\sum_{j=i+1}^{N_f}\beta_{ij}$	$\frac{1}{2V_s^2}\sum_{i=1}^{N_f}\sum_{j=1,j\neq i}^{N_f}\left[\beta_{ij}w_j\frac{2w_iw_j}{(w_i+w_j)\min(w_i,w_j)}\right]$
破碎	$\int_{v_{\min}}^{v_{\max}}S(v)n(v)\mathrm{d}v$	$\sum_{i=1}^{N_f}S_i/V_s$	$\sum_{i=1}^{N_f}S_i/V_s$	$\sum_{i=1}^{N_f}S_i/V_s$
冷凝 / 蒸发(表面生长 / 消融)	$C_{\mathrm{sur0}}\int_{v_{\min}}^{v_{\max}}D_s(v)n(v)\mathrm{d}v$	$C_{\mathrm{sur0}}\sum_{i=1}^{N_f}D_{s,i}/V_s$	$C_{\mathrm{sur0}}\sum_{i=1}^{N_f}D_{s,i}/V_s$	$C_{\mathrm{sur0}}\sum_{i=1}^{N_f}D_{s,i}/V_s$
成核	$V_sJ(v)\delta(v_{\min},v)$	$V_sJ(v)\delta(v_{\min},v)$	$V_sJ(v)\delta(v_{\min},v)/w$	$V_sJ(v)\delta(v_{\min},v)$
沉积	$\int_{v_{\min}}^{v_{\max}}R(v)n(v)\mathrm{d}v$	$\sum_{i=1}^{N_f}R_i/V_s$	$\sum_{i=1}^{N_f}R_i/V_s$	$\sum_{i=1}^{N_f}R_i/V_s$

表 4.9　各种 MC 方法对各工况的计算代价

参　数	阶梯式常体积法	常数目法	MMC 算法	IMMC 算法	EDCV-1/EDCV-A/EDCV-Ⅰ	EDCV-2/EDCV-B/EDCV-Ⅱ
T_{cpu}(s)，Case1	18.07	45.15	13.01	102.92	331.04	20.27
T_{cpu}(s)，Case2	—	—	43.83	848.69	8392.72	144.02
T_{cpu}(s)，Case3	6.55	2.99	20.59	—	6.24	5.90

$$T_i = \sum_{j=1,j\neq i}^{N_{\rm f}} \frac{\beta_{ij} w_i w_j^2}{(w_i + w_j)\min(w_i, w_j)} \tag{4.62}$$

当 $w_i = w_j = w$ 时，公式(4.61)即变为公式(4.58)，故“等数目权值虚拟颗粒群策略”时动力学事件速率是“异数目权值虚拟颗粒群策略”时动力学事件速率的特例。

4.9.3 等待时间的计算

不管是时间驱动 MC 方法还是事件驱动 MC 方法，一个共同的基础是认为离散系统中动力学事件的发生为一个标准的 Markov 过程，事件发生概率满足指数分布，两次动力学事件之间的等待时间(静止时间)满足指数分布。在事件驱动 MC 方法体系中，根据文献[40]，等待时间与所有动力学时间的发生概率之和成反比，即

$$\Delta t_k = \frac{1}{V_{\rm s}\sum_i R_{i,k}} \tag{4.63}$$

4.9.4 主事件的选择

如果认为离散系统中只发生某种动力学事件 l，则主事件(即在等待时间之后将要发生的事件)就是该事件 l；如果同时存在多种动力学事件，则动力学事件 l 是否为主事件基于如下概率：

$$P_l = \frac{R_l}{\sum_i R_i} = \frac{V_{\rm s} R_l}{V_{\rm s}\sum_i R_{i,k}} = V_{\rm s} R_l \Delta t_k \tag{4.64}$$

可以通过随机过程来选择主事件。图 4.30 中的步骤 1 即示意了主事件的选择过程。假设离散系统中可能存在的动力学事件为沉积、冷凝、破碎、凝并和成核，首先根据公式(4.64)分别计算出这些事件的发生概率 $P_{\rm depo}$、$P_{\rm cond}$、$P_{\rm brk}$、$P_{\rm coag}$ 和 $P_{\rm nuc}$，假设这些概率按照图 4.30 中步骤 1 所示的秩序依次排列，即 $P_{\rm depo}$、$P_{\rm cond}$、$P_{\rm brk}$、$P_{\rm coag}$和 $P_{\rm nuc}$。实际上这种排列方式完全可以是随机的，但是一旦确定好概率的排列秩序之后，就不能再更改，事件发生概率的排列秩序并不代表排列在前的事件具有优先发生的权利。然后通过一个在[0,1]区间内满足均匀分布的随机数 r 来判断主事件。如果 $0 < r \leqslant P_{\rm depo}$，则认为主事件为沉积事件；如果 $P_{\rm depo} < r \leqslant P_{\rm depo} + P_{\rm cond}$，则认为主事件为冷凝事件；如果 $P_{\rm depo} + P_{\rm cond} < r \leqslant P_{\rm depo} + P_{\rm cond} + P_{\rm brk}$，破碎事件被选择为主事件；如果 $P_{\rm depo} + P_{\rm cond} + P_{\rm brk} < r \leqslant P_{\rm depo} + P_{\rm cond} + P_{\rm brk} + P_{\rm coag}$，凝并事件为主事件；如果 $P_{\rm depo} + P_{\rm cond} + P_{\rm brk} + P_{\rm coag} < r \leqslant P_{\rm depo} + P_{\rm cond} + P_{\rm brk} + P_{\rm coag} + P_{\rm nucl} = 1$，主事件为成核事件。

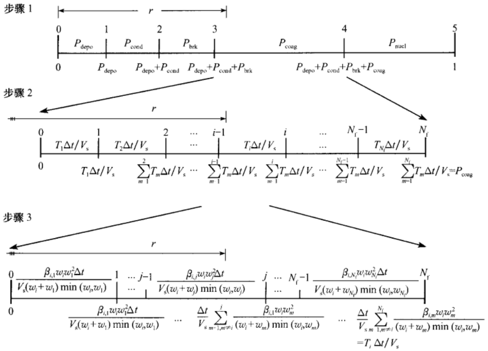


图 4.30　主事件和主颗粒选择的示意图(以凝并事件为例)

4.9.5　主颗粒的选择

一旦确定了主事件，则需要确定承担该种主事件的主颗粒。对于沉积、破碎和冷凝/蒸发等事件(单颗粒事件)而言，只需要确定一颗主颗粒；对于凝并事件(双颗粒事件)，需要确定两颗主颗粒；对于成核事件，并不需要确定主颗粒。某颗虚拟颗粒 i 发生单颗粒事件的概率满足如下分布：

$$\frac{K(v_i)}{\sum_i K(v_i)} \tag{4.65}$$

而某两颗虚拟颗粒 i 和 j 发生双颗粒事件的概率满足如下分布：

$$\frac{K(v_i,v_j)}{\sum_i \sum_{j,j\neq i} K(v_i,v_j)} \tag{4.66}$$

无论对于哪种事件，主颗粒的选择均可以通过两种方法来实现，即累积概率法(倒数法)和接受-拒绝法。这两种方法都遵守虚拟颗粒发生该事件的概率分布。

对于凝并事件而言，累积概率法选择主颗粒的过程如下：首先，如图 4.30 所示的步骤 2 所示，如果随机数 r 满足如下条件，则虚拟颗粒 i 为一颗主颗粒：

$$P_{\mathrm{depo}}+P_{\mathrm{cond}}+P_{\mathrm{brk}}+\frac{1}{V_{\mathrm{s}}}\sum_{m=1}^{i-1}T_m\Delta t_k<r\leqslant P_{\mathrm{depo}}+P_{\mathrm{cond}}+P_{\mathrm{brk}}+\frac{1}{V_{\mathrm{s}}}\sum_{m=1}^{i}T_m\Delta t_k \tag{4.67}$$

然后，另外一颗主颗粒，虚拟颗粒 i 的凝并伙伴 j，通过如下遍历程序实现：

$$\begin{aligned}P_{\mathrm{depo}}+P_{\mathrm{cond}}+P_{\mathrm{brk}}+\frac{\Delta t_k}{V_{\mathrm{s}}}\left[\sum_{m=1}^{i-1}T_m+\sum_{m=1,m\neq i}^{j-1}\frac{\beta_{i,m}w_iw_m^2}{(w_i+w_m)\min(w_i,w_m)}\right]<r\\ \leqslant P_{\mathrm{depo}}+P_{\mathrm{cond}}+P_{\mathrm{brk}}+\frac{\Delta t_k}{V_{\mathrm{s}}}\left[\sum_{m=1}^{i-1}T_m+\sum_{m=1,m\neq i}^{j}\frac{\beta_{i,m}w_iw_m^2}{(w_i+w_m)\min(w_i,w_m)}\right]\end{aligned} \tag{4.68}$$

在累积概率法中，两次虚拟颗粒遍历过程可能消耗较大的计算代价，特别是虚拟颗粒数目较多时，而接受-拒绝法在某些工况下可以提高主颗粒选择过程的计算效率。在这种方法中，首先通过随机过程选择两颗虚拟颗粒 i 和 j，如果随机数 r 满足如下条件，则认为虚拟颗粒 i 和 j 为发生凝并事件的两颗主颗粒：

$$\frac{\beta'_{i,j}}{\beta'_{\max}}=\frac{\beta_{i,j}w_j\dfrac{2w_iw_j}{(w_i+w_j)\min(w_i,w_j)}}{\max\limits_{\forall k,\forall m}\left\{\beta_{k,m}w_k\dfrac{2w_kw_m}{(w_k+w_m)\min(w_k,w_m)}\right\}} \tag{4.69}$$

式中：$\beta'_{i,j}$ 为"异数目权值虚拟颗粒凝并准则"下虚拟颗粒 i 和 j 的凝并核；$\beta'_{\max}$ 是"异数目权值虚拟颗粒凝并准则"中所有可能的凝并对的最大凝并核。如果 $\beta'_{\max}$ 被高估，虽然选择一对主颗粒的效率相应降低，但是仍然能够描述该 Markov 过程。

注意到，在事件驱动 MC 方法中，为了计算两次事件之间的等待时间，需要计算凝并事件发生速率 R_{coag}，此时需要对所有虚拟颗粒进行二重遍历，这个过程是事件驱动 MC 方法计算代价的最大贡献源，所耗费的计算代价的量级为 $O(N_{\mathrm{f}}^2)$，N_{f} 为虚拟颗粒数目。当 N_{f} 数值较大时，所耗费的 CPU 时间将非常大。在选择凝并事件的主颗粒的过程中，累积概率法的平均计算代价的量级为 $O(N_{\mathrm{f}}/2+N_{\mathrm{f}}/4)$，接受-拒绝法的计算代价则取决于具体情况，如果颗粒尺度谱分布较窄或者各凝并核之间的差异较小，其计算效率通常低于累积概率法。但是无论采用何种方法，其计算代价均远远小于等待时间的计算代价，此时讨论接受-拒绝法的高效率意义不大。然而，当仅仅考虑纯凝并事件时，Garcia 等[1]发展了一种高效的计算方案，此时首先通过接受-拒绝法选择两颗主颗粒，然后根据等待时间的指数分布，根据这两颗主颗粒的凝并核来计算等待时间，此时因为避免了虚拟颗粒的二重遍历而具有非常高的计算效率，但是这种计算方案只是近似描述了实际凝并过程，当演变时间较长时将呈现一定的数值误差。

4.9.6 虚拟颗粒数目的恢复和计算区域体积的保持

无论对于哪种MC方法，在动力学演变过程中，模拟颗粒数目和计算区域体积是两个需要特别关注的变量。过多的模拟颗粒数目将加剧计算代价，而过少的模拟颗粒数目则影响计算精度；计算区域的变动则影响算法的扩展性、工程应用和科学定量分析。事件驱动常体积法发展了一系列方法，在严格保持常体积的同时，尽可能保持常数目的特征。针对"等数目权值虚拟颗粒群策略"和"异数目权值虚拟颗粒群策略"，该算法恢复虚拟颗粒数目和保持计算区域的手段有一些差异，一一阐述如下。

1）"等数目权值虚拟颗粒群策略"

此时，为了尽可能避免对虚拟颗粒数目权值的扰动以造成计算效率和计算精度的降低，任何时刻均保持所有虚拟颗粒的数目权值相等，而虚拟颗粒数目在$N_{f0}/2\sim2N_{f0}$之间波动，N_{f0}为初始虚拟颗粒数目。

凝并事件：假设虚拟颗粒i(尺度v_i)和j(尺度v_j)发生二元凝并事件，则将产生一颗尺度为(v_i+v_j)的虚拟颗粒k，其数目权值仍然等于公共权值w，把虚拟颗粒k取代虚拟颗粒i，并抛弃虚拟颗粒j。此时一次凝并事件将导致虚拟颗粒总数目减1。

破碎事件：如果虚拟颗粒i(尺度为v，数目权值$w_i=w$)破碎，则首先根据$b(v)$和$\gamma(v,u)$得到子颗粒尺度分布，然后产生$b(v)$颗新的虚拟颗粒，这些虚拟颗粒的数目权值等于w，尺度根据子颗粒尺度分布依次得到。把第一颗子颗粒取代其母颗粒i的位置，其他$b(v)-1$颗子颗粒被依次存入虚拟颗粒数列中。一次破碎事件之后，虚拟颗粒总数目增加$b(v)-1$。在下一个时刻，所有这些虚拟颗粒均被跟踪。

冷凝/蒸发（表面生长/消融）事件：该事件发生之后，虚拟颗粒数目权值和总数目均无变化，但是发生该事件的虚拟颗粒的尺度改变。对于离散形式的冷凝/蒸发事件，虚拟颗粒i(尺度为v_i)发生该事件之后的尺度为$v_i\pm v_0$，其中"+"对应冷凝事件，"−"对应蒸发事件，v_0为冷凝单体分子的体积；对于连续形式的冷凝/蒸发事件，虚拟颗粒i发生该事件之后的尺度如下计算：

$$(v_i)_{\text{new}} = (v_i)_{\text{old}} \pm I_i \Delta t$$

式中：I_i为虚拟颗粒i的冷凝/蒸发核。

成核事件：发生一次该事件则虚拟颗粒总数目加1。新增的虚拟颗粒的数目权值为w，尺度为$v_{\min}$(前驱体的尺度)。

沉积事件：如果虚拟颗粒i被判定发生沉积事件，则该颗虚拟颗粒被抛弃而不再在之后被考虑，此时一次沉积事件将导致虚拟颗粒总数目减1。

以上事件的发生导致虚拟颗粒数目的波动。事件驱动常体积法(EDCV)发展了两种方案来恢复虚拟颗粒数目以保持计算精度和计算代价。与改进的MMC算法阶梯式处理过多或过少虚拟颗粒的方法类似，"阶梯式常数目方案"通过倍增或倍减虚拟颗粒数目权值的办法来恢复虚拟颗粒数目，虚拟颗粒总数目始终保持在

$N_{f0}/2 \sim 2N_{f0}$之间，具体步骤参照 4.6 节的相关内容。

某些情况下“阶梯式常数目方案”可能存在较为严重的“阶梯式误差”，针对此种情形，本节发展了一种新的数目恢复方案。当虚拟颗粒数目大于等于 $2N_{f0}$或者小于等于 $N_{f0}/2$ 时，统计当前虚拟颗粒群的颗粒尺度分布函数，然后根据此尺度分布函数，采用虚拟颗粒生成办法，重新产生一个总数目为 N_{f0}的新的虚拟颗粒群，新的虚拟颗粒群继承旧的虚拟颗粒群的统计信息。由于旧的虚拟颗粒群的颗粒尺度分布分布函数的信息可能不能完全传递和转移到新的虚拟颗粒群中，所以该种方案也仍然存在一定程度的“阶梯式误差”。这种虚拟颗粒数目恢复方案实际上对虚拟颗粒群进行重整，所以称为“重整方案”。另外需要注意的是，对于颗粒场除尺度分布函数之外的其他状态参数(如速度、温度、湍动能等)，“阶梯式常数目方案”的数目恢复动作之后，新的虚拟颗粒群在统计意义上具有与旧虚拟颗粒群相同的统计意义，而“重整方案”难以保证在数目恢复前后颗粒场的其他状态参数仍然在统计上保持一致。所以“重整方案”适合于在描述颗粒尺度分布函数时间演变过程的 MC 算法中采用，而不太适合那些需要同时考虑颗粒尺度分布函数时间和空间演变的 MC 算法，而“阶梯式常数目方案”则均可以被采用。“阶梯式常数目方案”和“重整方案”在哪种情况中被 MC 算法采用需要依据实际情况具体考虑。对于第 3 章所发展的改进的多重 Monte Carlo 算法，也可以采用“重整方案”来恢复虚拟颗粒数目，但是由于拟基于 MMC 算法进行多维系统颗粒群平衡模拟，此时必须保证恢复动作前后系统的动量和能量守恒，所以在 4.6 节中没有描述这种数目恢复方法。

2) “异数目权值虚拟颗粒群策略”

这种情况中，对于凝并事件，虚拟颗粒总数目自动保持不变，即“常数目方案”；其他事件仍然采用“等数目权值虚拟颗粒群策略”时的数目恢复方法(“阶梯式常数目方案”和“重整方案”)来保持模拟颗粒数目。

凝并：当数目权值不等的两颗虚拟颗粒 i 和 j 发生凝并时，虚拟颗粒 i 和 j 所代表的实际颗粒组中，均仅仅只有 $\min(w_i, w_j)$颗实际颗粒发生了实际颗粒之间的凝并事件，总的实际颗粒凝并事件数量为 $\min(w_i, w_j)$，生成了 $\min(w_i, w_j)$颗尺度为(v_i+v_j)的新的颗粒。所以虚拟颗粒 i 和 j 发生凝并之后，将有两类颗粒存在，一类是实际颗粒凝并事件所产生的“新”颗粒，一类是没有参与实际颗粒凝并事件的“旧”颗粒。新颗粒和旧颗粒分别重新被两虚拟颗粒 i 和 j 所代表，如图 4.25 所示，凝并之后虚拟颗粒的数目权值 w、尺度 v 和速度 $\boldsymbol{u}$ 参照公式(4.55)。

4.9.7　事件驱动常体积法的流程

至此，可以绘制出事件驱动常体积法的算法流程，如图 4.31 所示。本算法试图统一目前存在的基于事件驱动的几种主流 MC 算法，包括常体积法和阶梯式常体积法。事件驱动常体积法存在如下 4 个“开关”，见图 4.2 中的符号“Δ”：基于子

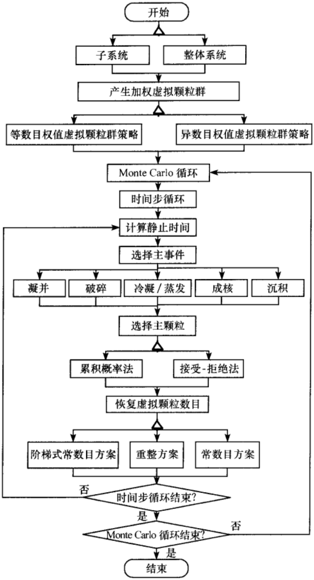


图 4.31　事件驱动常体积法的流程图

系统或整体系统的开关、“等数目权值虚拟颗粒群策略”或“异数目权值虚拟颗粒群策略”的开关、累积概率法或接受-拒绝法的开关、“阶梯式常数目方案”或“重整方案”或“常数目方案”的开关。根据所研究的实际问题，用户可以自由开启不同的开关。例如，如果子系统概念、“等数目权值虚拟颗粒群策略”(特别地，公共数目权值 w 等于 1)和“阶梯式常数目方案”被采用，本事件驱动常体积法非常类似于阶梯式常体积法。

4.10 事件驱动常体积法与几种主流 Monte Carlo 方法的比较

与改进的 MMC 算法的验证方案类似，这里重点检验事件驱动常体积（EDCV）法对于凝并事件和多重破碎事件的描述精度。

4.10.1 Case1，初始单分散性颗粒群的常凝并核工况

这种工况的计算条件与 4.5.1 节的 Case1 或 4.7.1 节的 Case1 完全类似。模拟结果如图 4.32 所示，其中 IMMC 算法采用“异数目权值虚拟颗粒群策略”、“常数目方案”和累积概率法实现，而 EDCV-1 为采用“异数目权值虚拟颗粒群策略”的 EDCV 方法，EDCV-2 为采用“等数目权值虚拟颗粒群策略”和“阶梯式常数目方案”的 EDCV 方法。这种工况主要用于检验 EDCV 方法所基于的“异数目权值虚拟颗粒群策略”、“异数目权值虚拟颗粒凝并准则”等的正确性。其中两种 EDCV 方法均采用接受-拒绝法实现凝并伙伴的寻找。

由图 4.32 模拟结果可知，EDCV-2 的模拟结果非常类似于阶梯式常数目法，这表明阶梯式常体积法实际上是 EDCV 方法的一种特例。实际上，EDCV-2 跟踪整体系统，每颗虚拟颗粒均具有相同的数目权值，它通过公共数目权值的倍减来恢复虚拟颗粒数目；而阶梯式常体积法跟踪子系统，子系统内每颗模拟颗粒的公共数目权值为 $w_s=1$，从整体系统来看，每颗模拟颗粒的公共数目权值为 $w=V/V_s$，它通过子系统的倍增来实现模拟颗粒数目的恢复，实际上也是实现整体系统中公共数目权值 w 的倍减；所以两种算法本质上是相同的，只是基于不同的跟踪系统而采用不同的数目权值倍减方案而已。

然而，恒定地保持模拟颗粒数目不变的 EDCV-1 的对于颗粒数目浓度 N 的模拟结果精度，虽然稍微高于 IMMC 算法和常数目法，但是低于 EDCV-2，主要原因上可归纳为虚拟颗粒数目权值的扰动所造成的“常数目误差”，而对于凝并工况，阶梯式常体积法和 EDCV-1 几乎不存在“阶梯式误差”；两种 EDCV 方法对于颗粒质量浓度的描述均能达到严格的精度；EDCV-1 由于引入“异数目权值虚拟颗粒群策略”而能更精确地描述颗粒尺度分布函数的时间演变，特定时刻颗粒尺度谱高端部分的动力学演变过程也能相对准确地描述。

几种 MC 的计算代价的比较如表 4.9 所示，EDCV-1 的较高计算代价归结为计算凝并概率时计算代价为 $O(N_f^2)$，而“等数目权值虚拟颗粒群策略”的 MC（阶梯式常体积法、常数目法和 EDCV-1）此时的计算代价为 $O(N_f^2/2)$，且 EDCV-1 中跟踪的虚拟颗粒数目为 N_{f0}，但是阶梯式常体积法和 EDCV-1 跟踪的虚拟颗粒数目为 $N_{f0}/2\sim N_{f0}$。

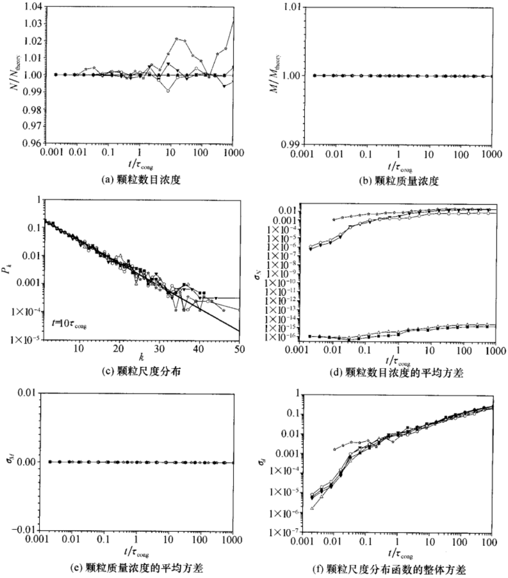


图 4.32　Case1，初始单分散性颗粒群的常凝并核工况

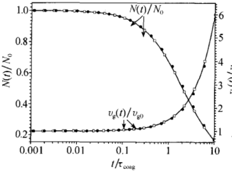
——理论分析解；-△-阶梯式常体积法；-▼-常数目法；

-☆- IMMC 算法；-○- EDCV-1；-■- EDCV-2

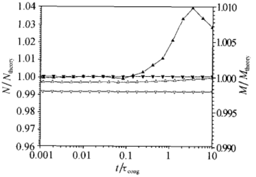
4.10.2　Case2，初始指数分布多分散性颗粒群的常凝并核工况

这种工况的计算条件完全与 4.7.2 节中 Case2 相同，主要用于检验 EDCV 方法对于初始多分散性颗粒群的凝并过程的描述精度。其中 EDCV-A 为采用"异数

目权值虚拟颗粒群策略"的 EDCV 方法，EDCV-B 为采用"等数目权值虚拟颗粒群策略"和"阶梯式常数目方案"的 EDCV 方法。其中两种 EDCV 方法均采用累积概率法实现凝并伙伴的寻找。由图 4.33 可知，两种 EDCV 方法均相对高精度地描述了颗粒尺度分布函数的各阶矩、特定时刻颗粒尺度分布函数。EDCV-A 由于"常数目误差"而对颗粒数目浓度 N 有一定偏差，但是精确描述了颗粒质量浓度 M 的演变；对于 EDCV-B，由于初始时刻需要对连续型指数分布颗粒尺度谱进行离散，"等数目权值虚拟颗粒群策略"使得生成的初始虚拟颗粒群无法完全继承实际颗粒群的颗粒尺度分布函数的信息，所以存在明显的"离散误差"，实际颗粒群尺度谱的高端和低端部分都无法被虚拟颗粒群所描述，这种"离散误差"影响了 EDCV-B 对于 N、M 和特定时刻颗粒尺度分布函数的描述精度。



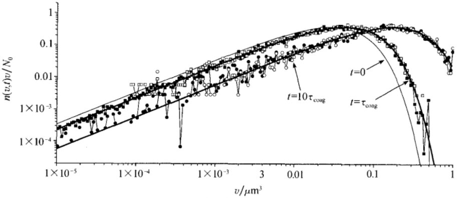
(a) 颗粒数目浓度和平均尺度



(b) 颗粒数目浓度和质量浓度

— 理论分析解； • $N(t)/N_0$, $v_g(t)/v_{g0}$, EDCV-A； ▫ $N(t)/N_0$, $v_g(t)/v_{g0}$, EDCV-B

-▲- N/N_{theory}, EDCV-A； -△- N/N_{theory}, EDCV-B； -▼- M/M_{theory}, EDCV-A； -▽- M/M_{theory}, EDCV-B



(c) 颗粒尺度分布函数的时间演变

—— 初始颗粒尺度分布曲线； ━━ 理论分析解； -▪- EDCV-A，$t=\tau_{\text{coag}}$； -▫- EDCV-B，$t=\tau_{\text{coag}}$； -•- EDCV-A，$t=10\tau_{\text{coag}}$； -○- EDCV-B，$t=10\tau_{\text{coag}}$

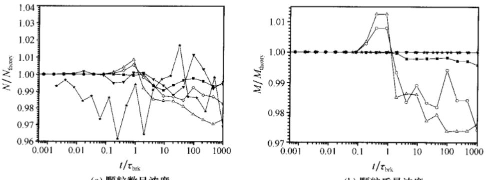
图 4.33 Case2，初始指数分布多分散性颗粒群的常凝并核工况

几种算法对于该工况的计算代价的比较如表 4.2 所示，可知，采用“异数目权值虚拟颗粒凝并准则”的 MC 方法（IMMC 算法和 EDCV-A）比采用“等数目权值虚拟颗粒凝并准则”的 MC 方法（MMC 算法和 EDCV-B）计算代价更大，这主要归因于前者的时间窗口以更精确、更精细地方式被离散的缘故；另外，前者跟踪更多的虚拟颗粒也是重要的原因。对于常凝并核这种特殊工况，事件驱动 MC 方法的效率低于时间驱动 MC 方法，这在 4.5 节中已经详细分析。

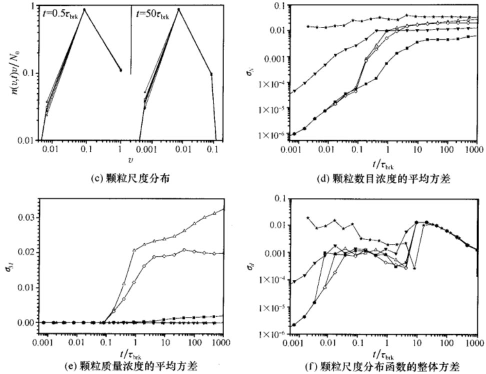
4.10.3 Case3，初始单分散性颗粒群的多元破碎工况

本工况的计算条件完全与 4.5.2 节中的 Case4 相同。这种工况中，颗粒数目急剧增长，主要用于检验事件驱动常体积法对于“单颗粒事件”的描述精度和处理过多虚拟颗粒的能力。其中 EDCV-Ⅰ采用“阶梯式常数目法”处理过多的虚拟颗粒数目，而 EDCV-Ⅱ采用“重整方案”来恢复虚拟颗粒数目。

由图 4.34 可知，EDCV-Ⅱ对于颗粒数目浓度 N 的计算精度明显高于其他 MC 方法（包括 EDCV-Ⅰ），这是因为采用“重整方案”时虚拟颗粒数目恢复之前和之后的颗粒尺度分布函数这个统计参数得到了更好地保持，所以 EDCV-Ⅱ虽然仍然存在“阶梯式误差”，但是这种误差明显小于阶梯式常体积法和 EDCV-Ⅰ的“阶梯式误差”；另外，EDCV-Ⅰ采用“阶梯式常数目方案”恢复虚拟颗粒数目，对颗粒数目权值和整体系统的扰动小于常数目 MC 方法（常数目法和 MMC 算法），所以计算精度比常数目 MC 方法更高一些。EDCV-Ⅱ对质量浓度 M 的描述精度非常好，虽然低于常数目法和 MMC 算法的描述精度，但是明显高于其他阶梯式常数目 MC 方法（阶梯式常体积法和 EDCV-Ⅰ）的计算精度，原因同上。几种 MC 方法对于颗粒尺度分布函数均具有非常高的精度，几乎无法分辨哪种算法计算精度更高一些。



(a) 颗粒数目浓度　　(b) 颗粒质量浓度



(c) 颗粒尺度分布

(d) 颗粒数目浓度的平均方差

(e) 颗粒质量浓度的平均方差

(f) 颗粒尺度分布函数的整体方差

图 4.34 Case3，指数法则破碎速率，等尺度子颗粒分布，初始单分散性颗粒群
——理论分析解； -△-阶梯式常体积法； -▼-常数目法； -★- MMC 算法； -◇- EDCV-Ⅰ； -■- EDCV-Ⅱ

4.11 事件驱动常体积法小结

虽然 MMC 算法基于时间驱动模式的特点使得其便于与两相湍流模型耦合起来、从而具有多维颗粒群平衡模拟的扩展性，但是应该注意到，当仅仅描述颗粒尺度分布的时间演变过程时，MC 方法并不需要与两相湍流模型耦合，而通常事件驱动 MC 方法比时间驱动 MC 方法具有更高的计算精度和计算效率，我们正是基于此点发展了一种新的事件驱动常体积（EDCV）法[41]。

EDCV 方法仍然借鉴 MMC 算法的若干优点，引入加权虚拟颗粒的概念和保持常体积特征。EDCV 法把“等数目权值虚拟颗粒群策略”和“异数目权值虚拟颗粒群策略”、累积概率法和接受-拒绝法等技术统一在一个框架下，并发展了一种全新的虚拟颗粒数目恢复方案——“重整方案”，在某些工况下（如多元破碎工况等），这种方案比倍增或倍减虚拟颗粒数目权值的“阶梯式常数目方案”具有更小的“阶梯式误差”。EDCV 法首次在事件驱动 MC 方法的框架下处理不同数目权值虚拟

颗粒之间的凝并过程，使得该算法具有更小的“离散误差”和更广泛的扩展空间。

至此，我们已经分别基于时间驱动 MC 方法和事件驱动 MC 方法框架发展了两种全新的 MC 算法——(改进的)MMC 算法和事件驱动常体积法，这两种 MC 方法的共同特点是引入加权虚拟颗粒概念、以整体系统为模拟对象、模拟过程中保持计算区域不变、虚拟颗粒数目保持在一定范围之内、可以根据实际工况选择累积概率法和接受拒绝法来选择凝并伙伴、发展了异数目权值虚拟颗粒凝并准则并把等数目权值虚拟颗粒凝并准则作为其的一个特例、可以根据实际工况来选择合适的虚拟颗粒数目恢复方案等。相比较于目前已存在的基于时间驱动 MC 方法和基于事件驱动 MC 方法，经数值试验比较和检验，证明 MMC 算法和 EDCV 方法分别达到了两类 MC 方法尽可能高的计算精度和计算效率，这对颗粒群平衡模拟是一个贡献。

参 考 文 献

[1] Garcia A L, van den Broek C, Aertsens M, et al. A Monte Carlo simulation of coagulation. Physica A: Statistical and Theoretical Physics, 1987, 143(3): 535—546.

[2] Lin Y, Lee K, Matsoukas T. Solution of the population balance equation using constant-number Monte Carlo. Chemical Engineering Science, 2002, 57(12): 2241—2252.

[3] Hu K C, Mei R. Particle collision rate in fluid flows. Physics of Fluids, 1998, 10(4): 1028—1030.

[4] Liffman K. A direct simulation Monte Carlo method for cluster coagulation. Journal of Computational Physics, 1992, 100(1): 116—127.

[5] Nanbu K. Direct simulation scheme derived from the Boltzmann equation. I: Monocomponent gases. Journal of the Physical Society of Japan, 1980, 49(5): 2042—2049.

[6] Blatz P J, Tobolsky A V. Note on the kinetics of systems manifesting simultaneous polymerization-depolymerization phenomena. The Journal of Physical Chemistry, 1945, 49 (2): 77—79.

[7] Diemer R B, Olson J H. A moment methodology for coagulation and breakage problems. Part 1: Analytical solution of the steady-state population balance. Chemical Engineering Science, 2002, 57(12): 2193—2209.

[8] Patil D P, Andrews J R G. An analytical solution to continuous population balance model describing floc coalescence and breakage——a special case. Chemical Engineering Science, 1998, 53(3): 599—601.

[9] Landgrebe J D, Pratsinis S E. A discrete-sectional model for particulate production by gas-phase chemical reaction and aerosol coagulation in the free-molecular regime. Journal of Colloid and Interface Science, 1990, 139(1): 63—86.

[10] Zhao H, Zheng C, Xu M. Multi-Monte Carlo method for coagulation and condensation/evaporation in dispersed systems. Journal of Colloid and Interface Science, 2005, 286(1):

195—208.

[11] 赵海波,郑楚光. 凝并和冷凝/蒸发对颗粒尺度分布的影响. 化学工程,2006,34(6):21—25.

[12] Zhao H,Zheng C. Stochastic algorithm and numerical simulation for drop scavenging of aerosols. Applied Mathematics and Mechanics(English edition),2006,27(10):1321—1332.

[13] Zhao H,Zheng C. Monte Carlo solution of wet removal of aerosols by precipitation. Atmospheric Environment,2006,40(8):1510—1525.

[14] 赵海波,郑楚光. 描述颗粒沉积动力学演变过程的一种随机算法. 空气动力学学报,2006,24(2):141—146.

[15] 赵海波,郑楚光,徐明厚. 处理多分散颗粒凝并和冷凝/蒸发问题的多重 Monte Carlo 算法. 化工学报,2005,56(5):796—801.

[16] 赵海波,郑楚光. 同时发生的颗粒凝并和沉积现象的 Monte Carlo 模拟. 中国科学 E 辑:技术科学,2006,36(3):270—284.

[17] Zhao H B,Zheng C G. Monte Carlo simulation for simultaneous particle coagulation and deposition. Science in China Series E-Technological Sciences,2006,49(2):222—237.

[18] 赵海波,郑楚光. 凝并和成核机理下颗粒尺度分布的 Monte Carlo 求解. 高等学校化学学报,2005,26(11):2086—2089.

[19] 赵海波. 颗粒群平衡模拟的随机模型与燃煤可吸入颗粒物高效脱除的研究[博士学位论文]. 武汉:华中科技大学,2007.

[20] Leyvraz F. Scaling theory and exactly solved models in the kinetics of irreversible aggregation. Physics Reports,2003,383(2-3):95—212.

[21] Zhao H,Zheng C,Xu M. Multi-Monte Carlo method for general dynamic equation considering particle coagulation. Applied Mathematics and Mechanics(English edition),2005,26(7):953—962.

[22] 赵海波,郑楚光,徐明厚. 求解考虑颗粒凝并的通用动力学方程的多重 Monte Carlo 算法. 应用数学与力学,2005,26(7):875—882.

[23] Friedlander S K,Wang C S. The self-preserving particle size distribution for coagulation by Brownian motion. Journal of Colloid Science,1966,22(2):126—132.

[24] Smith M,Matsoukas T. Constant-number Monte Carlo simulation of population balances. Chemical Engineering Science,1998,53(9):1777—1786.

[25] Vemury S,Kusters K A,Pratsinis S E. Time-lag for attainment of the self-preserving particle size distribution by coagulation. Journal of Colloid and Interface Science,1994,165(1):53—59.

[26] Seinfeld J H. Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution. New York:Wiley,1986.

[27] Williams M M R,Loyalka S K. Aerosol Science:Theory and Practice. New York:Pergamon Press,1991.

[28] Zhao H, Zheng C, Xu M. Multi-Monte Carlo method for particle coagulation: Description and validation. Applied Mathematics and Computation, 2005, 167(2): 1383—1399.

[29] Fernandez-Diaz J M, Muniz C G P, Brana M A R, et al. A modified semi-implicit method to obtain the evolution of an aerosol by coagulation. Atmospheric Environment, 2000, 34 (25): 4301—4314.

[30] Kruis F E, Maisels A, Fissan H. Direct simulation Monte Carlo method for particle coagulation and aggregation. AIChE Journal, 2000, 46(9): 1735—1742.

[31] Kostoglou M, Karabelas A J. An assessment of low-order methods for solving the breakage equation. Powder Technology, 2002, 127(2): 116—127.

[32] Kostoglou M. Exact self-similar solutions to the fragmentation equation with homogeneous discrete kernel. Physica A: Statistical and Theoretical Physics, 2003, 320: 84—96.

[33] Ziff R M. New solutions for the fragmentation equation. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, 1991, 24(12): 2821—2828.

[34] 赵海波,郑楚光,徐明厚. 用多重 Monte Carlo 算法研究超细微颗粒物同时发生的凝并和破碎. 中国电机工程学报, 2005, 25(16): 96—101.

[35] Zhao H, Zheng C, Xu M. Multi-Monte Carlo approach for general dynamic equation considering simultaneous particle coagulation and breakage. Powder Technology, 2005, 154 (2-3): 164—178.

[36] Lee K, Matsoukas T. Simultaneous coagulation and break-up using constant-N Monte Carlo. Powder Technology, 2000, 110(1-2): 82—89.

[37] Diemer R B. Moment Methods for Coagulation, Breakage and Coalescence Problems[PhD thesis]. Newark: University Delaware, 1999.

[38] Maisels A, Kruis F E, Fissan H. Direct simulation Monte Carlo for simultaneous nucleation, coagulation, and surface growth in dispersed systems. Chemical Engineering Science, 2004, 59(11): 2231—2239.

[39] Balthasar M, Kraft M. A stochastic approach to calculate the particle size distribution function of soot particles in laminar premixed flames. Combustion and Flame, 2003, 133 (3): 289—298.

[40] Shah B H, Ramkrishna D, Borwanker J D. Simulation of particulate systems using the concept of the interval of quiescence. AIChE Journal, 1977, 23(6): 897—904.

[41] Zhao H, Zheng C. The event-driven constant volume method for particle coagulation dynamics. Science in China Series E-Technological Sciences, 2008, 51(8): 1—17.

5　多维颗粒群平衡模拟的 Monte Carlo 方法

第 3、4 章介绍了零维颗粒群平衡模拟的几种 MC 方法，实际上是在一个零维空间系统中对颗粒群平衡方程(PBE)进行数值求解，以描述颗粒尺度分布时间演变过程，此时不考虑颗粒尺度分布函数的对流项、扩散项及流体-颗粒相互作用等。实际上，多维空间系统内进行颗粒群平衡模拟有着更广泛的应用范围和必要性：一方面，为了精确地控制离散系统的动力学演变过程、改进反应器设计和优化操作条件等，有必要描述动力学演变过程中颗粒尺度分布的时间和空间非均匀结构，以及颗粒动力学演变过程与两相流场所存在的非线性耦合关系；另外一方面，各种动力学事件的核模型通常受两相流场结构所控制(如颗粒局部富集效应和湍流输运效应可以使得局部凝并速率超过平均值 10 倍以上[1])，即核模型表现出强烈的空间关联性，所以准确描述颗粒动力学演变过程必须考虑颗粒尺度分布的空间非均匀性；最后，颗粒动力学演变过程对颗粒场施加非线性影响并进而影响流体场，而两相流场的变化将对颗粒动力学演变过程施加影响，即准确地描述一个复杂系统必须考虑四向耦合效应。本章首先分析多维颗粒群平衡模拟在模型本身和数值方法方面需要解决的关键问题；然后重点介绍我们所发展的多维多重 Monte Carlo 算法。

5.1　多维颗粒群平衡模拟的关键问题

多维颗粒群平衡模拟(PBM)考虑颗粒尺度分布、流体速度场、温度场和组分场在空间的非均匀性，求解多维空间系统中的颗粒群平衡方程。相比较于零维颗粒群平衡模拟，多维 PBM 研究相对要少得多，主要困难在于模型的建立和数值方法[2]。模型方面至少存在如下一些难点：大部分多相流模型主要针对于单分散性颗粒群，难以考虑多分散性颗粒群与流体相之间复杂的相互作用，包括质量、动量和能量的交换和转移；这些多相流模型难以对破碎、成核、表面生长和凝聚等微尺度过程进行特征描述和模拟；对于多分散性系统(特别是稠密相)中单个颗粒所受的曳力也知之甚少。

由于颗粒相与流体相之间的四向耦合，加上 PBE 方程本身的部分积分微分特性，多维系统的数值方法也是主要难点之一。为了对多维空间系统进行颗粒群平衡模拟，数值方法至少需要具备以下三个特点：

(1) 具有与描述两相湍流场的数值方法耦合的扩展性。如方程(1.2)所示，描

述颗粒尺度分布的空间演变过程需要获得流体相和颗粒相的信息(如两相速度场等),所以必须与两相湍流模型进行耦合。基于欧拉坐标体系的方法(如矩方法、分区法、离散-分区法等)适合与双流体模型(欧拉-欧拉模型)耦合起来,MC 方法适合与流体-轨道模型(欧拉-拉格朗日模型)耦合起来。

(2) 具有引入网格划分技术的扩展性。几种欧拉方法可以方便地与网格划分技术耦合起来,而普通 MC 方法由于引入"子系统"概念而必然伴生的周期性边界条件、常数目法中子系统的扩展收缩等使得其难以在空间上进行网格划分。

(3) 具有考虑四向耦合的扩展性,即考虑各种动力学事件对颗粒场和流体场的影响及这些影响反过来对动力学演变过程的影响。四种欧拉方法及双流体模型基于容积/统计平均描述,对颗粒运动特征的分辨率小于拉格朗日模型,较难考虑四向耦合,MC 方法和欧拉-拉格朗日模型则由于可以得到颗粒的轨道经历效应和历史效应而具有考虑四向耦合的良好扩展性。

对于欧拉方法而言,把它们与空间坐标关联起来并不困难。如对于矩方法,可以写出其矩输运方程如下(仅仅考虑凝并事件时):

$$\begin{aligned}\frac{\partial M_m}{\partial t}+\frac{\partial(u_j M_m)}{\partial x_j}=&\frac{\partial}{\partial x_j}\left[\int_{v_{\min}}^{v_{\max}} v^m D\,\frac{\partial n(x_j,v,t)}{\partial x_j}\mathrm{d}v\right]\\&+\frac{1}{2}\int_{v_{\min}}^{v_{\max}}\int_{v_{\min}}^{v_{\max}}\beta(x_j,v,u)\left[(u+v)^m-u^m-v^m\right]\\&\cdot n(x_j,v,t)n(x_j,u,t)\mathrm{d}u\,\mathrm{d}v\end{aligned}\tag{5.1}$$

式中:D 为颗粒扩散系数,与颗粒尺度相关。

对于自由分子区的颗粒,Settumba 和 Garrick[3] 和 Aristizabal 等[4] 分别给出了不同的方法来处理方程(5.1)中的扩散项,使其成为 M_m 的二阶导数。此时,求解方程(5.1)的关键问题就是多重积分的源项的处理,此时所面临的困难基本与零维颗粒群平衡模拟时所面临的困难相同,可以采用第 4 章所述的传统矩方法、积分矩方法、直接积分矩方法、内插封闭矩方法等克服这个困难,在此不再多述。诸多研究者基于以上思想实现了复杂离散系统的多维颗粒群平衡模拟,如 Garrick 等[3] 把矩方法与求解流体相湍流模型的有限差分法耦合起来描述非定常混合层中纳米颗粒的自由分子区布朗凝并过程;Wen 等[5] 利用矩方法、耦合标准 k-ε 模型和详细的化学反应机理来模拟煤油/空气喷射扩散火焰中碳烟的生成和生长;Christofides 等[6,7] 利用矩方法、耦合流体反应组分(NH_3 和 HCl)守恒方程、反应器温度方程描述了一维反应器内化学反应、成核、冷凝、凝并等物理化学机理控制下颗粒尺度分布的时空演变过程(spatio-temporal evolution);Frenklach 等[8] 利用矩方法研究高压层流预混火焰中碳烟颗粒的凝聚等过程,Balthasar 等也利用矩方法研究了局部混合柱塞流反应器[9] 和层流预混火焰[10,11] 中 soot 的生成和生长等

过程；Zucca 等[12]通过耦合化学动力学、流体力学和颗粒群平衡模拟而定量描述了乙烯-空气湍流非预混火焰中的 soot 生成，其中采用直接矩积分方法求解颗粒群平衡方程。利用矩方法进行多维 PBM 的一个优点在于可望实现 CFD 与矩方法的嵌合，因为两者的数学模型基于同样的时间驱动模式和求解策略。如 Falk 等[13]实现了流体相湍流模型、化学反应动力学和颗粒群平衡模拟的耦合，用于描述化学反应器中的制备过程，所涉及的动力学事件包括成核、生长和团聚等，该模型采用 CFD 商业软件包 FLUENT 的标准 k-ε 模型描述流体相湍流场，采用概率密度函数方法描述组分化学反应，并通过矩方法描述颗粒尺度分布的时空演变。整体看来，目前矩方法更多地被用于复杂系统的多维 PBM。

分区法同样可以用于多维 PBM。此时，区间 l 内的某个属性 Q_l 的时间和空间输运方程为

$$\frac{\partial Q_l}{\partial t}+\frac{\partial (u_j Q_l)}{\partial x_j}=\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{D}_l\frac{\partial Q_l}{\partial x_j}\right)+\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{l-1}\sum_{j=1}^{l-1}{}^{1}\bar{\beta}_{i,j,l}Q_iQ_j-Q_l\sum_{i=1}^{l-1}{}^{2}\bar{\beta}_{i,l}Q_i-\frac{1}{2}{}^{3}\bar{\beta}_{l,l}Q_l^2-Q_l\sum_{i=l+1}^{m}{}^{4}\bar{\beta}_{i,l}Q_i \tag{5.2}$$

式中：$\overline{D}_l$ 为分区平均扩散系数，定义为

$$\overline{D}_l=\frac{\int_{v_{l-1}}^{v_l}D\mathrm{d}v}{v_l-v_{l-1}} \tag{5.3}$$

可以采用第 l 个区间的代表尺度 x_l 的颗粒扩散系数 D_{xl} 来近似 $\overline{D}_l$。此时方程(5.2)的主要求解困难同样类似于零维颗粒群平衡模拟时所遇到的难题，不同的分区法有不同的解决办法。一般来说，多维 PBM 的分区法较矩方法更为复杂，但仍然因其能够描述颗粒尺度分布函数演变过程的细节信息和对初始条件的低要求而得到了一定程度的应用。如 Choi 等[14]利用分区法、耦合求解气相雷诺应力模型的有限体积法，模拟了二维轴对称管式反应器内非球形多分散性颗粒群在凝并和成核等影响下的颗粒尺度分布的空间扩散规律；Lockwood 等[15]把分区法与气相湍流模型耦合起来描述重金属在 PM 上的富集过程；Kim 等[16,17]利用一种半隐式(semi-implicit)分区法考虑了柴油机排放的烟羽中 PM 在均相成核和凝并机制控制下的生成和生长过程；Wen 等[18]利用一种移动的分区法(a moving sectional method)考虑了颗粒凝并、PAH(多环芳烃)表面冷凝、颗粒表面生长等多种动力学机制控制下 soot 颗粒的形成。Lu 等[19]把离散-分区法与求解气相雷诺应力模型的有限体积法耦合起来，描述管式 CVD (化学气相沉积)反应器中纳米颗粒的生成、生长与沉积过程。作为一种基于欧拉体系的方法，分区法同样可以与 CFD 耦合起来，从而大大增强程序的适用范围和编程难度。Nere 和 Ramkrishna[20]把

CFD与固定网格离散方法结合起来求解考虑纯凝并事件的多维颗粒群平衡方程，可以预报湍流工况中微物理过程控制下的颗粒尺度分布时空演变。

也有少数研究者研究了另外一些基于欧拉体系的数值方法实现多维PBM的可行性。如Garrick等[21]采用直接数值模拟描述湍流场细节信息、采用节点方法求解通用动力学方程，模拟二维不可压缩等温剪切边界层内纳米颗粒群在对流、扩散和凝并影响下的时空演变过程；Campos和Lage[22]通过引入广义化空间关联脉冲函数构建了颗粒群平衡模拟的欧拉-拉格朗日混合表达式，并采用高阶整体偏差消除策略、算子分裂方法和网格重整技术来求解多维多变量颗粒群平衡方程；Qamar等[23]采用一种自适用高精度有限容积法来进行结晶过程的多维颗粒群平衡模拟，此时采用一种周期性移动空间网格点的技术来实现网格重整；Dorao和Jakobsen[24,25]利用最小二次幂谱方法求解多维多变量颗粒群平衡方程。这些研究相对来说还没有自成体系，也更为复杂，应用范围有限，在此不展开一一介绍。

对于拉格朗日方法如Monte Carlo方法而言，如果需要用于描述PSD的时空演变，则问题要复杂一些，主要原因是MC方法与基于欧拉体系的流体模型进行耦合的时候存在一些困难，需要发展一些特殊的算子分裂技术来实现两者的耦合，且MC方法较难与成熟的CFD耦合起来。目前有少数研究者实现了MC方法的多维PBM。Hollander等[26]利用MC方法描述颗粒尺度分布的动力学演变、利用Lattice Boltzmann方法模拟湍流场，研究了槽道流中各向异性流场对颗粒同向凝并的影响；Sabelfeld、Kolodko和Wagner等[27,28]发展了随机欧拉和拉格朗日模型，利用时间驱动MC方法在拉格朗日坐标系统中描述空间各向异性的Smoluchowski方程，对湍流场做了诸多假设而难以在工程中得到广泛应用。Kraft等[29]把强核函数法与气相湍流模型耦合，用于描述层流预混火焰中soot经历颗粒生成(particle inception)、凝并/表面反应的尺度分布时间和空间演变过程[30]。Zhao等[31]也应用这种高效MC方法研究了层流预混乙烯-氧-氩火焰中双峰分布的soot颗粒群的动力学演变过程。

综合来看，目前多维颗粒群平衡模拟大都不描述颗粒的运动，仅仅把颗粒群平衡模拟与连续相湍流模拟耦合起来，通过颗粒群平衡模拟描述颗粒尺度分布的动力学演变，并不考虑颗粒-流体的相互作用。实际上，基于欧拉体系的矩方法、分区法等可以较为方便地与流行的流体相湍流模型耦合起来(同样基于欧拉体系)，但是，描述颗粒运动时，如果采用轨道模型，当然对经历复杂动力学过程的颗粒运动特征的分辨率更高，但是基于拉格朗日体系的轨道模型往往与基于欧拉体系的矩方法、分区法等格格不入；如果采用欧拉模型描述颗粒运动，而目前考虑复杂动力学演变的欧拉模型还并不成熟，精度和模型复杂性均是需要克服的大问题。对于基于拉格朗日体系的MC方法来说，要把其与描述颗粒运动的轨道模型耦合起来难度不大，但是与基于欧拉体系的流体相模型之间的耦合存在难题。所以，目前大部分多维PBM均是不考虑颗粒相运动的多维PBM，它描述轨道跟踪性好的细微

颗粒群的动力学演变过程是基本可行的。但是从复杂系统动力学演变过程的精确描述出发、从模型的完整性出发，这些“伪”多维 PBM 还远远不够，“真”多维 PBM 应当与多相湍流模型耦合起来，考虑四向耦合效应，特别是对于较大尺度或者(局部)非均匀浓度和结构的颗粒群。

实现完整多维 PBM 的 MC 需要至少具有如下特点：①由于需要与网格划分技术耦合起来，必须具有常体积特性；②为了保持稳定的计算精度，应该具有(阶梯式)常数目特性；③为了更好地与基于时间驱动框架的两相湍流模型算法耦合起来，最好是基于时间驱动 MC 方法，而事件驱动 MC 方法在与两相湍流模型耦合的过程中，由于理论基础的差异，必须引入一些假设，必将带来新的数值误差。以上三个特点正是第 4 章中我们所发展的 MMC 算法的特点，本节的目的正是采用改进的 MMC 算法(本章简称为 MMC 算法)进行多维颗粒群平衡模拟，以描述多维空间系统中 PSD 的时空动力学演变过程。

5.2 多维颗粒群平衡模拟的多重 Monte Carlo 算法

零维颗粒群平衡模拟的 MMC 算法与描述两相湍流模型的数值方法耦合起来，构成一个四向耦合两相湍流模型，不仅可以获得颗粒尺度分布的时间和空间演变过程，而且可以得到颗粒场和流体场的详细信息。值得强调的是，多维颗粒群平衡模拟的 MMC 算法可以考虑的颗粒动力学事件包括碰撞、凝并、破碎、沉积、成核和冷凝/蒸发等，而零维颗粒群平衡模拟的 MMC 算法无法考虑颗粒碰撞事件。欧拉-拉格朗日两相湍流模型是描述两相流场的主流方法之一，非常适合与基于拉格朗日体系的 MMC 算法耦合起来。描述流体相的欧拉湍流模型和算法不胜枚举，从细观模型、介观模型到统观模型，从直接数值模拟、大涡模拟到湍流模式理论，从双方程模型、代数应力模型到雷诺应力模型，等等。而描述颗粒相的拉格朗日模型主要包括确定性轨道模型、随机轨道模型和 Langevin 随机模型等。这里给出稀疏气固两相流的雷诺应力-拉格朗日 PDF 两相湍流模型，连续相由雷诺应力模型描述，颗粒相由拉格朗日 Langevin 方程描述。本章的重点是在多维空间系统内描述颗粒动力学演变过程，所以对复杂的两相湍流模型和算法并不着重描述。

5.2.1 雷诺应力模型描述流体相运动

大量的模拟实践表明，目前对有旋转、有回流、各向异性的复杂湍流的描述较为成功的是各种雷诺应力模型(RSM)[32]。本章采用雷诺应力模型(二阶矩模型)来模拟流体相的湍流运动。

为了与密度加权形式的颗粒相湍流模型相匹配，对气相控制方程也采用质量加权的时平均方法，并考虑相间的相互作用，可以从气相的瞬态输运方程得到时间

平均方程，形式如下[33,34]：

流体相连续性方程：

$$\frac{\partial \bar{\alpha}_g \bar{\rho}_g}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\alpha}_g \bar{\rho}_g \bar{u}_{gk}}{\partial x_k} = 0 \tag{5.4}$$

流体相动量方程：

$$\frac{\partial \bar{\alpha}_g \bar{\rho}_g \bar{u}_{gi}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\alpha}_g \bar{\rho}_g \bar{u}_{gk} \bar{u}_{gi}}{\partial x_k} = -\frac{\partial \bar{\alpha}_g \bar{\rho}_g \overline{u_{gk} u_{gi}}}{\partial x_k} - \bar{\alpha}_g \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \bar{\alpha}_g \frac{\partial \Gamma_{ij}}{\partial x_j} - \sum \frac{\bar{\alpha}_p \bar{\rho}_p}{\tau_p} (\bar{u}_{gi} - \bar{u}_{pi}) \tag{5.5}$$

流体相雷诺应力方程：

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\alpha}_g \bar{\rho}_g \overline{u_{gi} u_{gj}}) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\alpha}_g \bar{\rho}_g \bar{u}_{gk} \overline{u_{gi} u_{gj}}) = D_{ij} + G_{ij} + \Pi_{ij} - \varepsilon_{ij} + P_{ij} \tag{5.6}$$

式中：D_{ij}、G_{ij}、Π_{ij}、ε_{ij}和P_{ij}分别表示了雷诺应力的扩散、产生、再分配、耗散和相间湍动能的传递，它们的模型分别如下[35]：

$$\left\{\begin{aligned}
D_{ij} &= \frac{\partial}{\partial x_k} \left(c_s \bar{\alpha}_g \bar{\rho}_g \frac{k}{\varepsilon} \overline{u_{gk} u_{gl}} \frac{\partial \overline{u_{gi} u_{gj}}}{\partial x_k} \right) \\
G_{ij} &= -\bar{\alpha}_g \bar{\rho}_g \left(\overline{u_{gi} u_{gk}} \frac{\partial \bar{u}_{gj}}{\partial x_k} + \overline{u_{gj} u_{gk}} \frac{\partial \bar{u}_{gi}}{\partial x_k} \right) \\
\Pi_{ij} &= \Pi_{ij,1} + \Pi_{ij,2} + \Pi_{ij,w} \\
\Pi_{ij,1} &= -c_1 \frac{\varepsilon}{k} \bar{\alpha}_g \bar{\rho}_g \left(\overline{u_{gi} u_{gj}} - \frac{2}{3} \delta_{ij} k_g \right) \\
\Pi_{ij,2} &= -c_2 \left(G_{ij} - \frac{2}{3} \delta_{ij} G_{ii} \right) \\
\Pi_{ij,w} &= C_{1w} \bar{\alpha}_g \bar{\rho}_g \frac{\varepsilon}{k} \left(\overline{u_{gk} u_{gm}} n_k n_m \delta_{ij} - \frac{3}{2} \overline{u_{gk} u_{gi}} n_k n_j - \frac{3}{2} \overline{u_{gk} u_{gj}} n_k n_i \right) f_w \\
&\quad + C_{2w} \left(\Pi_{km,2} n_k n_m \delta_{ij} - \frac{3}{2} \Pi_{ik,2} n_k n_j - \frac{3}{2} \Pi_{jk,2} n_k n_i \right) f_w \\
\varepsilon_{ij} &= \frac{2}{3} \delta_{ij} \bar{\alpha}_g \bar{\rho}_g \varepsilon \\
P_{ij} &= -\sum \frac{\bar{\alpha}_p \bar{\rho}_p}{\tau_p} [2 \overline{u_{gi} u_{gj}} - \overline{u_{gi} u_{pj}} - \overline{u_{gj} u_{pi}} + (\bar{u}_{gi} - \bar{u}_{pi}) \bar{u}_{gj,p} + (\bar{u}_{gj} - \bar{u}_{pj}) \bar{u}_{gi,p}]
\end{aligned}\right. \tag{5.7}$$

式中：$f_w = (C_\mu^{3/4}/\kappa)(k^{1.5}/\varepsilon y_w)$；$n_i$是垂直于壁面单元的第$i$个分量；$y_w$是和壁面的垂直距离。这里，扩散项给出的是各向异性的梯度扩散系数。而压力再分配项由三部分构成：$\Pi_{ij,1}$是纯粹的湍流量间相互作用，称为各向同性回归项，也称为慢速

项；$\Pi_{ij,2}$是平均拉伸率和湍流的作用，称为快速项；$\Pi_{ij,w}$表示了固壁面对$\Pi_{ij,1}$和$\Pi_{ij,2}$的作用，用来减轻壁面附近的各向同性的回归[36]。对耗散项的处理是基于局部各向同性假设的近似。颗粒对气相湍流的作用源项P_{ij}是为了考虑颗粒-湍流相互作用。

湍动能耗散率ε的输运方程：

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\alpha}_g\bar{\rho}_g\varepsilon)+\frac{\partial}{\partial x_k}(\bar{\alpha}_g\rho_g u_{gk}\varepsilon)=\frac{\partial}{\partial x}\left(c_\varepsilon\frac{k}{\varepsilon}\overline{u_{gk}u_{gl}}\frac{\partial\varepsilon}{\partial x_l}\right)+\frac{\varepsilon}{k}c_{\varepsilon1}\ (G_{ii}-c_{\varepsilon2}\bar{\alpha}_g\rho_g\varepsilon)+P_\varepsilon \tag{5.8}$$

式中颗粒对湍流耗散率的源项P_ε和湍动能产生项G_{ii}的模型为[37]

$$\begin{aligned}P_\varepsilon&=-C_{\varepsilon2}\frac{\varepsilon}{k}\sum\frac{\bar{\alpha}_p\bar{\rho}_p}{\tau_p}[(\overline{u_{gi}u_{gi}}-\overline{u_{gi}u_{pi}})+(\bar{u}_{gi}-\bar{u}_{pi})\bar{u}_{gi,p}]\\G_{ii}&=-\bar{\alpha}_g\bar{\rho}_g\,\overline{u_{gi}u_{gk}}\frac{\partial\bar{u}_{gi}}{\partial x_k}\end{aligned} \tag{5.9}$$

5.2.2 拉格朗日 Langevin 方程描述颗粒相运动

如何确定在颗粒轨道上所见流体微团的速度是拉格朗日研究的关键和难点，也是了解两相间的湍流相互作用，特别是湍流对颗粒作用的关键。颗粒在湍流场中的运动受到颗粒的特性、携带颗粒流场的湍流特性和外部体积力（如重力）的共同作用，同时颗粒的湍流脉动还受其自身的湍动能惯性及平均动能与湍动能间转化的作用。

对于稀疏悬浮流，忽略颗粒所受的浮力、虚假质量力、Basset 力、Magnus 力、Saffman 力、热泳力和压力梯度力等，仅考虑重力和阻力，则在拉格朗日坐标系中，颗粒运动及颗粒所见流体微团的瞬时速度的拉格朗日 Langevin 方程组[38,39]可写为

$$\frac{dx_{pi}}{dt}=u_{pi} \tag{5.10}$$

$$\frac{du_{pi}}{dt}=g_i+\frac{1}{\tau_p}(u_{gi,p}-u_{pi}) \tag{5.11}$$

$$\begin{aligned}\frac{du_{gi,p}}{dt}=&\left[g_i-\frac{1}{\bar{\rho}_g}\frac{\partial\bar{p}}{\partial x_i}+\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\nu\frac{\partial\bar{u}_{gi}}{\partial x_j}\right)\right]\\&+(u_{pj}-u_{gj})\frac{\partial\bar{u}_{gi}}{\partial x_j}+[G_{gp,ij}(u_{gj}-\bar{u}_{gj})+B_{gp,i}^{1/2}\omega_i]\end{aligned} \tag{5.12}$$

式中：τ_p为颗粒自身弛豫时间尺度；$G_{gp,ij}$为相空间漂移系数；$B_{gp,i}$为相空间扩散系数；ω_i为高斯白噪声。

颗粒所见流体微团瞬时速度的 Langevin 方程[79]（5.12）中，右边第一部分反映重力场、压力场、流体平均速度场对流体微团的加速度，第二部分反映颗粒和流

体微团轨道差异和流体平均速度梯度的附加作用项，第三部分则用于考虑黏性脉动、压力脉动和颗粒相对流体运动等的影响。对 $G_{gp,ij}$ 和 $B_{gp,i}$ 的模型封闭可以考虑颗粒的"轨道穿越效应"、"连续性效应"和"惯性效应"[33,40]。

5.2.3 数值模拟的流程

求解欧拉-拉格朗日两相湍流模型的数值方法通常都是基于时间驱动模式，而 MMC 算法也是基于时间驱动的 MC，所以欧拉-拉格朗日两相湍流模型和 MMC 算法耦合起来的关键在于时间步长 Δt 的设置。在一个恰当的 Δt 内，不仅仅认为流体运动与颗粒运动是相互解耦的，而且认为颗粒运动与颗粒动力学演变过程也是相互解耦的，也就是说，在该 Δt 内，可以依次单独地计算流体运动、颗粒运动和颗粒的动力学演变过程，并通过在时间步长内交换流体场和颗粒场的信息而实现流体-颗粒场的四向耦合。数值模拟的程序如下设计：

步骤 1：处理边界条件；初始化气相场和颗粒场；生成虚拟颗粒群。

步骤 2：开始一次 MC 循环，在每次 MC 循环中采用不同的随机数产生器产生满足均匀分布、[0,1]的随机数 r；进行多次 MC 循环并采用取平均值的办法可以提高 MC 模拟的计算精度，减少统计噪声，一般进行 3～5 次 MC 循环。

步骤 3：按照时间驱动模式开始时间步长循环。

步骤 4：根据 $n-1$ 时刻两相流场的信息，估计 n 时刻时间步长 Δt_n，保证流体场和颗粒场的互相解耦及颗粒运动与颗粒动力学演变过程的互相解耦；5.2.4 节将详述时间步长的计算。

步骤 5：采用 SIMPLEC 算法求解流体相方程组，依次求解 $\overline{u}_g$、$\overline{v}_g$、$\overline{w}_g$、$\overline{p}$、ε、$\overline{u_g u_g}$、$\overline{v_g v_g}$、$\overline{w_g w_g}$、$\overline{u_g v_g}$、$\overline{v_g w_g}$、$\overline{u_g w_g}$ 方程及 k、μ_e，其中两相相互作用源项采用颗粒相的当前值计算。

步骤 6：气相流场收敛，或者已经迭代 C_g 次，则进入步骤 7；否则返回步骤 5，继续迭代。

步骤 7：按照颗粒拉格朗日模型并行演化各虚拟颗粒的状态参量，包括 x_p、y_p、z_p、u_p、v_p、w_p、$u_{g,p}$、$v_{g,p}$、$w_{g,p}$ 等。

步骤 8：在当前 Δt_n 末端开始考虑颗粒动力学演变过程，对所有虚拟颗粒进行遍历以跟踪所有可能的动力学事件，包括当前跟踪的虚拟颗粒是否发生某个动力学事件的判断、动力学事件对颗粒相状态参量的影响，虚拟颗粒数目的恢复等，5.2.4 节将详述。

步骤 9：利用 PSIC(单元中颗粒源项)[41]思想，得到流体相方程组中的颗粒相附加源项，在下一个时刻返回到流体相控制方程组中，以实现流体-颗粒的两相耦合；对各样本颗粒进行统计，得到颗粒的宏观平均量 $\overline{n}_p$、$\overline{u}_p$、$\overline{v}_p$、$\overline{w}_p$ 和脉动关联量，包括颗粒相雷诺应力 $\overline{u_p u_p}$、$\overline{v_p v_p}$、$\overline{w_p w_p}$、$\overline{u_p v_p}$、$\overline{v_p w_p}$、$\overline{u_p w_p}$ 和两相雷诺应力 $\overline{u_p u_g}$、

$\overline{v_p v_g}$、$\overline{w_p w_g}$、$\overline{u_p v_g}$、$\overline{u_p w_g}$、$\overline{v_p u_g}$、$\overline{v_p w_g}$、$\overline{w_p u_g}$、$\overline{w_p v_g}$和漂移速度 $\overline{u}'_{g,p}$、$\overline{v}'_{g,p}$、$\overline{w}'_{g,p}$等；这些统计参数将在下一个时间步长返回两相控制方程组，以实现模型的四向耦合。

步骤 10：T_l 为系统演变时间长度，如果 $\Sigma_n \Delta t_n < T_l$，则转入步骤 3；否则，本次 MC 循环完成，进入下一步。

步骤 11：如果 MC 循环次数小于指定数目，则转入步骤 2，继续下一次 MC 循环；否则，进入下一步。

步骤 12：对多次 MC 循环的结果进行平均，输出结果。

图 5.1 为多维颗粒群平衡模拟或四向耦合两相湍流模型的算法流程图，关键之处在于多维空间系统中利用多重 Monte Carlo 算法考虑颗粒动力学演变过程，重中之重是描述双颗粒事件（碰撞/凝并）在何时、何地、以何种方式发生。

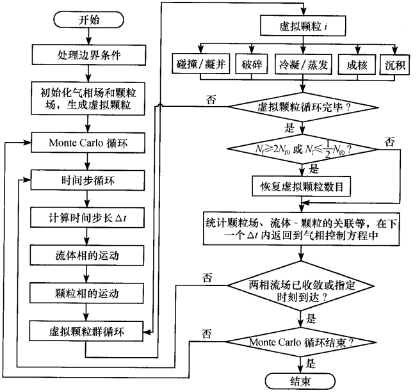


图 5.1　多维颗粒群平衡模拟的多重 Monte Carlo 算法的流程图

5.2.4　多重 Monte Carlo 算法描述颗粒动力学演变

1) 时间步长的计算

因为考虑颗粒之间的相互作用，对于时间步长的设置，除了需要满足气固两相

流的一般要求以实现流体相运动与颗粒相运动的解耦之外(小于颗粒自身弛豫时间尺度 τ_p 和流体积分时间尺度 T_e),还需要另外一些特殊的要求。设网格的边长为 $l_q(q=x,y,z)$,颗粒速度的各个分量的最大值为 u_{pq}^{max}。由于碰撞/凝并事件涉及两颗颗粒,如果需要在多维空间系统中遍历所有可能的颗粒对以判断其是否发生碰撞/凝并事件,计算量将急剧增长。为了减少检测颗粒碰撞/凝并的计算量,应该确保颗粒在一个时间步长 Δt 内的最大位移小于当前网格的任一长度 l_q,即时间步长应该小于流体对网格的穿越时间尺度:

$$\Delta t \leqslant \frac{l_q}{u_{pq}^{max}} \qquad (q=x,y,z) \tag{5.13}$$

这样,在 Δt 内,可能与中心网格内的跟踪颗粒发生碰撞/凝并的颗粒处于中心网格或与之相邻的其他 26 个(2 维计算域为 8 个)网格内。

由于涉及颗粒的动力学事件,为了实现颗粒动力学事件之间的互相解耦,对于时间步长的设置来说,另外一个重要的限制条件就是:必须保证在一个时间步长范围内,每颗颗粒只可能发生一次某一类型的事件(可以一颗颗粒在一个时间步长范围内发生几个不同类型的事件),这样才不至于遗漏对任何一次颗粒动力学事件的模拟。

值得注意的是,本章认为颗粒凝并这一事件必然是由于两颗粒相互接触(即碰撞)所引起的,在本章中,对于凝并事件,均认为碰撞效率和凝并效率等于 1,而对于碰撞事件,认为碰撞效率等于 1 而凝并效率等于 0。

在某个网格 k 内,假设有 N_k 个实际颗粒,N_{fk} 个虚拟颗粒,那么,在公式(5.13)的制约下,网格 k(体积为 V_{sk})内的某虚拟颗粒 i 只可能与当前网格 k 或相邻网格(相邻网格数目为 3^d-1,d 为维数)内的其他虚拟颗粒发生碰撞/凝并事件,此时精确的计算虚拟颗粒 i 的凝并概率 C_i 需要遍历所有 3^d 个网格内的所有虚拟颗粒,必将耗费比较大的计算代价。此时

$$C_i = \sum_{m=1}^{3^d} \left\{ \frac{1}{V_{sm}^2} \sum_{j=1,i\neq j}^{N_{fm}} \left[\beta_{ij,m} w_j \frac{2w_i w_j}{(w_i+w_j)\min(w_i,w_j)} \right] \right\} \tag{5.14}$$

式中:V_{sm}和 N_{fm}分别为网格 m 的容积和网格 m 内虚拟颗粒总数目;$\beta_{ij,m}$为两颗虚拟颗粒 i 和 j 在网格 m 内的碰撞/凝并核,应该注意到,碰撞/凝并核具有空间关联性,这与零维颗粒群平衡模拟中的碰撞/凝并核截然不同。

实际上,在同一网格内发生凝并的概率远远大于不同网格之内发生凝并的概率,Sommerfeld[42,43] 和 Tsuji[44] 等均假设颗粒碰撞/凝并发生在同一网格之内。虽然参与碰撞/凝并事件的两颗粒位于同一网格内的概率远远大于不同网格内的概率,但是以上模型仍然与实际碰撞/凝并过程有一定差异。参与碰撞/凝并事件的两颗粒的位置与两颗粒相对速度、时间步长、网格长度、网格划分技术等紧密相关。

从直接模拟 Monte Carlo 方法的角度，本算法并不限制颗粒的碰撞/凝并事件仅仅发生在同一网格之内，而是依据如下步骤处理：认为所有可能的动力学事件均只在当前时间步长 Δt 的末端瞬间完成，所以，首先确定当前跟踪的虚拟颗粒 i 在 Δt 末端所在的网格 l，本节“当前时间步长 Δt 末端虚拟颗粒 i 所在网格的选择”部分将描述具体过程。如果这颗虚拟颗粒 i 确定将要在 Δt 内发生一次碰撞/凝并事件，则认为其碰撞/凝并伙伴位于网格 l 之内；然后，通过遍历网格 l 内的所有虚拟颗粒计算出单位时间、单位体积内虚拟颗粒 i 的碰撞/凝并概率 $C_{\mathrm{f},i,l}$（单位为 $\mathrm{s}^{-1}\cdot\mathrm{m}^{-3}$）；最后，采用随机过程来判断 i 是否发生碰撞/凝并事件、在网格 l 内搜寻其碰撞/凝并伙伴。这种处理方案只需要对某个网格 l 内的虚拟颗粒进行遍历，而不需要对 3^d 个网格内的所有虚拟颗粒进行遍历，必将大大减小 MC 的计算代价。

此时，虚拟颗粒 i 发生两次碰撞/凝并事件之间的时间间隔[称为碰撞/凝并时间尺度($t_{i,\mathrm{coag}}$)]为

$$t_{i,\mathrm{coag}} = \frac{1}{V_{\mathrm{s}l} C_{\mathrm{f},i,l}} \tag{5.15}$$

同样，某虚拟颗粒 i 在网格 l 内的破碎时间尺度($t_{i,\mathrm{brk}}$)、冷凝时间尺度($t_{i,\mathrm{cond}}$)、和沉积时间尺度($t_{i,\mathrm{depo}}$)及成核时间尺度(t_{nucl})分别为

$$t_{i,\mathrm{brk}} = \frac{1}{S_{i,l}} \tag{5.16}$$

$$t_{i,\mathrm{cond}} = \frac{v_i}{I_{i,l}} \quad \text{或} \quad t_{i,\mathrm{cond}} = \frac{1}{C_{\mathrm{s},l} D_{\mathrm{s}i,l}} \tag{5.17}$$

$$t_{i,\mathrm{depo}} = \frac{1}{R_{i,l}} \tag{5.18}$$

$$t_{\mathrm{nucl}} = \frac{1}{J(x_l, v, t)\delta(v_{\min}, v) V_{\mathrm{s},l}^2} \tag{5.19}$$

上述式中：$S_{i,l}$、$I_{i,l}$、$R_{i,l}$ 分别为当前时刻虚拟颗粒 i（体积为 v_i）在网格 l 内的破碎核、连续形式冷凝核和沉积核；$C_{\mathrm{s},l}$ 为当前时刻、网格 l 内冷凝单体的数目浓度；$D_{\mathrm{s}i,l}$ 为当前时刻、网格 l 内虚拟颗粒 i 发生离散形式冷凝事件的速率常数；$J(x_l, v, t)$ 为当前时刻 t、网格 l（坐标为 x_l）内由于成核过程而产生尺度为 v 的核体的速率，即成核核。

对所有网格之内的所有颗粒进行遍历，可以得到保证动力学事件互相解耦的时间步长限制公式如下：

$$\Delta t \leqslant \alpha \min_{\forall i}\{t_{i,\mathrm{coag}}, t_{i,\mathrm{brk}}, t_{i,\mathrm{cond}}, t_{i,\mathrm{depo}}, t_{\mathrm{nucl}}\} \tag{5.20}$$

式中：α 为乘积因子，一般 $\alpha \leqslant 0.01$，引入乘积因子的目的是尽可能实现颗粒运动与颗粒动力学演变的相互解耦，α 越小，颗粒演变过程越接近实际工况，计算精度将越高，但是计算代价将也相应增加。

因此，在多维 PBM 的 MMC 算法中，时间步长应该如下确定：

$$\Delta t \leqslant \min\{\tau_{\mathrm{p}}, T_{\mathrm{e}}, \min_{\forall q}\{l_q/u_{\mathrm{p}q}^{\max}\}, \alpha \times \min_{\forall i}\{t_{i,\mathrm{coag}}, t_{i,\mathrm{brk}}, t_{i,\mathrm{cond}}, t_{i,\mathrm{depo}}, t_{\mathrm{nucl}}\}\} \tag{5.21}$$

式中：$q=x,y,z$；$i=1\sim N_{\mathrm{f}}$。

2）颗粒碰撞/凝并的考虑

如前所述，本 MMC 算法考虑碰撞/凝并时，先于判断当前跟踪的虚拟颗粒 i 是否发生碰撞/凝并行为，首先确定该虚拟颗粒 i 在时间步长 Δt 末端可能运动到哪一个网格，即首先确定可能与 i 发生碰撞/凝并的伙伴颗粒所在的网格 l。时间步长始端 i 所在网格记为 k，网格 l 可能与网格 k 相同，也可能相异；然后，依据颗粒碰撞/凝并概率判断当前跟踪的虚拟颗粒是否与网格 l 内的某颗虚拟颗粒发生碰撞/凝并事件，如果发生，则遍历网格 l 内的所有虚拟颗粒，利用累积概率法或者接受-拒绝法选择一颗虚拟颗粒 j 作为 i 的碰撞/凝并伙伴。

（1）当前时间步长 Δt 末端虚拟颗粒 i 所在网格的选择。

某虚拟颗粒 i 在当前时间步长 Δt 的始端和末端所在网格是否为同一网格与以下因素有关：两颗颗粒各自的速度、时间步长、网格长度、网格划分的方法等。

这里考虑按照有限容积法[45,46]来划分网格，控制容积（网格）为立方体，假设时间步长 Δt 始端 i 所在网格 k 的坐标编号为(n_{xk}, n_{yk}, n_{zk})，而 Δt 末端所在网格 l 的编号为(n_{xl}, n_{yl}, n_{zl})。以 x 方向为例说明如何采用随机过程来确定网格 l，如图 5.2 所示。

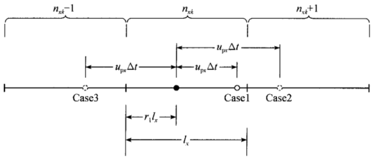


图 5.2 颗粒碰撞/凝并位置示意图

在 Δt 的始端，当前跟踪的虚拟颗粒 i 位于网格 n_{xk} 内，以均匀概率随机分布于该网格的任何位置上。离网格 n_{xk} 西端的距离为 $r_1 \times l_x$（r_1 为单独生成的满足均匀分布、位于[0,1]的随机数，l_x 为网格 n_{xk} 的 x 方向网格长度），如图 5.2 中黑点所示，在 Δt 时间步长内其运动距离为 $u_{px}\Delta t$，它在时间窗口 Δt 的末端的位置如图 5.2 中白点所示，存在三种情况：

① Case1，无论颗粒运动方向是向左还是向右，在 Δt 的末端虚拟颗粒 i 仍然位于网格 n_{xk} 之内，即满足如下关系：$r_1 l_x + u_{px}\Delta t \leqslant l_x$ 且 $r_1 l_x - u_{px}\Delta t \geqslant 0$，也就是 $u_{px}\Delta t/l_x \leqslant r_1 \leqslant 1 - u_{px}\Delta t/l_x$。这种情况下，虚拟颗粒 i 在时间步长 Δt 末端所在网格 $n_{xl} = n_{xl}$。

② Case2，颗粒向右运动，且在 Δt 的末端虚拟颗粒 i 超出了当前网格的范围，即 $r_1 l_x + u_{px}\Delta t > l_x$，或者 $r_1 > 1 - u_{px}\Delta t/l_x$，此时 $n_{xl} = n_{xk} + 1$。

③ Case3，颗粒向左运动，且在 Δt 的末端虚拟颗粒 i 超出了当前网格的范围，即 $r_1 l_x < u_{px}\Delta t$，或者 $r_1 < u_{px}\Delta t/l_x$，此时 $n_{xl} = n_{xk} - 1$。其他方向 y 和 z 的情况类似于 x 方向。

所以，可以利用随机过程得到当前时间步长末端虚拟颗粒 i 所在网格 l 的编号：

$$
x\text{ 方向，}\begin{cases}
\text{Case1：当}\dfrac{u_{px}\Delta t}{l_x} \leqslant r_1 \leqslant 1 - \dfrac{u_{px}\Delta t}{l_x}\text{ 时，} & n_{xl} = n_{xk} \\[2ex]
\text{Case2：当 } r_1 > 1 - \dfrac{u_{px}\Delta t}{l_x}\text{ 时，} & n_{xl} = n_{xk} + 1 \\[2ex]
\text{Case3：当 } r_1 < \dfrac{u_{px}\Delta t}{l_x}\text{ 时，} & n_{xl} = n_{xk} - 1
\end{cases}
$$

$$
y\text{ 方向，}\begin{cases}
\text{Case1：当}\dfrac{u_{py}\Delta t}{l_y} \leqslant r_2 \leqslant 1 - \dfrac{u_{py}\Delta t}{l_y}\text{ 时，} & n_{yl} = n_{yk} \\[2ex]
\text{Case2：当 } r_2 > 1 - \dfrac{u_{py}\Delta t}{l_y}\text{ 时，} & n_{yl} = n_{yk} + 1 \\[2ex]
\text{Case3：当 } r_2 < \dfrac{u_{py}\Delta t}{l_y}\text{ 时，} & n_{yl} = n_{yk} - 1
\end{cases}
\tag{5.22}
$$

$$
z\text{ 方向，}\begin{cases}
\text{Case1：当}\dfrac{u_{pz}\Delta t}{l_z} \leqslant r_3 \leqslant 1 - \dfrac{u_{pz}\Delta t}{l_z}\text{ 时，} & n_{zl} = n_{zk} \\[2ex]
\text{Case2：当 } r_3 > 1 - \dfrac{u_{pz}t}{l_z}\text{ 时，} & n_{zl} = n_{zk} + 1 \\[2ex]
\text{Case3：当 } r_3 < \dfrac{u_{pz}\Delta t}{l_z}\text{ 时，} & n_{zl} = n_{zk} - 1
\end{cases}
$$

(2) 虚拟颗粒 i 是否发生碰撞/凝并的判断。

一旦确定了当前时间步长末端虚拟颗粒 i 所在的网格 l，接下来需要立即确定 i 是否会与该网格中某颗虚拟颗粒发生一次碰撞/凝并事件。此时可以把网格 l 作为整体系统，进行零维颗粒群平衡模拟，描述其内所发生的碰撞/凝并等事件。首先计算当前跟踪的虚拟颗粒 i 与网格 l 内的虚拟颗粒发生碰撞/凝并的总概率 $C_{f,i,l}$：

$$
C_{f,i,l} = \frac{1}{V_{sk}V_{sl}} \sum_{m=1,i\neq j}^{N_{fl}} \beta_{im,l} w_m \frac{2w_i w_m}{(w_i + w_m)\min(w_i, w_m)} \tag{5.23}
$$

然后，如果 r_4 为满足均匀分布、位于[0,1]的随机数，则判断跟踪颗粒 i 在 Δt 内是否会发生一次碰撞/凝并事件的数学关系式为

$$r_4 \leqslant 1-\exp\left(\frac{-V_{sl}C_{f,i,l}\Delta t}{2}\right) \approx \frac{V_{sl}C_{f,i,l}\Delta t}{2} \tag{5.24}$$

(3) 虚拟颗粒 i 的碰撞/凝并伙伴的选择。

如果已经确定虚拟颗粒 i 将发生碰撞/凝并事件，则需要选定与其发生相互作用的伙伴颗粒。为了降低程序的复杂性，此时仅仅把网格 l 内的虚拟颗粒作为候选伙伴。这种处理方式实际上是基于如下思想：在时间步长 Δt 范围内，假设只有当前跟踪的虚拟颗粒 i 在运动，而其他所有颗粒均冻结静止，被动地接受当前跟踪的 i 可能与其发生的碰撞/凝并事件。此时 MMC 可以摆脱大部分 DSMC 算法认为发生碰撞/凝并的两颗颗粒位于同一网格的限制，而且可以只对网格(n_{xl}，n_{yl}，n_{zl})内的虚拟颗粒进行遍历，从而可以尽可能地减少计算代价。当然，该判断准则显得有些粗糙，特别是采用冻结的方法，用跟踪颗粒的速度来代替两颗颗粒速度差，有点高估了碰撞/凝并发生在同一网格中的概率，但是为了折中计算精度与计算代价，仍然采用此判断准则，5.3 节的数值模拟证明其已经具备一定精度。

累积概率法或接受-拒绝法均可以准确地描述虚拟颗粒 i 的碰撞/凝并过程，因为此时以网格 l 作为整体系统进行零维颗粒群平衡模拟，选择伙伴颗粒的具体过程可以参照第 4 章相关内容。

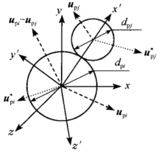
(4) 碰撞/凝并后果的处理。

就算法的角度而言，凝并与碰撞的最大区别之一是一次二元凝并即导致实际颗粒总数目减 1，而碰撞并不改变颗粒总数目，所以凝并导致颗粒尺度分布随时间和空间发生改变，而碰撞仅使得颗粒尺度分布的空间扩散。MMC 算法保持凝并过程中虚拟颗粒数目的具体方法及凝并事件发生之后虚拟颗粒的速度等状态参数的计算方法，均可参见第 4 章相关内容，在此不再重复。这里着重描述对碰撞事件的后果处理。对于碰撞过程，本章考虑的颗粒为刚性球体，颗粒之间的碰撞为完全弹性碰撞，不考虑碰撞产生颗粒旋转，碰撞无黏附和滑移。

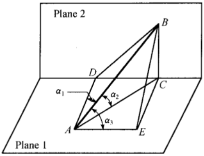
(5) 等数目权值虚拟颗粒的碰撞动力学。

不必要考查虚拟颗粒 i 中的实际颗粒是如何与虚拟颗粒 j 中的实际颗粒进行配对以完成 $w_i(=w_j=w)$ 次实际碰撞事件。由于虚拟颗粒是实际颗粒的指示器，此时两虚拟颗粒的碰撞动力学完全相当于两实际颗粒的碰撞动力学。假设球形颗粒 i 和 j 的质量分别为 m_{pi} 和 m_{pj}，体积(直径)分别为 $v_{pi}(d_{pi})$ 和 $v_{pj}(d_{pj})$，其碰撞前线速度分别为 $\boldsymbol{u}_{pi}$ 和 $\boldsymbol{u}_{pj}$。如图 5.3(a)所示，两颗颗粒发生碰撞时，在碰撞发生处建立新的坐标系(x'，y'，z')，其中，x' 轴与两个相撞的颗粒中心连线共线，y' 轴位于由 x' 轴和两颗粒瞬时速度矢量差($\boldsymbol{u}_{pj}-\boldsymbol{u}_{pi}$)确定的平面内且与 x' 轴垂直；z' 轴则与

y'、x'相垂直。碰撞后线速度分别为 $\boldsymbol{u}_{pi}^*$ 和 $\boldsymbol{u}_{pj}^*$。



(a) 颗粒碰撞动力学示意图



(b) 颗粒碰撞位置示意图

图 5.3　颗粒碰撞示意图

根据动量守恒定律和能量守恒定律，碰撞后的颗粒线速度如下[47]：

$$\begin{cases} u_{pi,x'}^* = u_{pi,x} - \dfrac{J_{x'}}{m_{pi}}, \quad v_{pi,y'}^* = v_{pi,y}, \quad w_{pi,z'}^* = w_{pi,z} \\ u_{pj,x'}^* = u_{pj,x} + \dfrac{J_{x'}}{m_{pj}}, \quad v_{pj,y'}^* = v_{pj,y}, \quad w_{pj,z'}^* = w_{pj,z} \end{cases} \tag{5.25}$$

式中：

$$J_{x'} = \frac{(u_{pj,x} - u_{pi,x})(2m_{pi}m_{pj})}{m_{pi} + m_{pj}}$$

然后再把新坐标系(x',y',z')转换到原来的坐标系(x,y,z)，得到碰撞之后的以原坐标系(x,y,z)表示的颗粒线速度。这时需要确定碰撞瞬间颗粒的具体接触位置才能进行坐标转换。如图 5.3(b)所示，A、B 分别为颗粒 i、j 的中心质点位置，AB 线段长度即为两颗粒中心距离，总是保持为$(d_{pi}+d_{pj})/2$。A、B 点所在的平面 Plane 1 和 Plane 2 垂直，BC 垂直于 Plane 1，AD 垂直于 Plane 2，AE 与 DC 平行，AB 与 AD、AC 和 AE 的夹角分别为 α_1、α_2 和 α_3，三个角之间的关系可以推导如下：

$$\cos\alpha_3 = \sqrt{|\sin^2\alpha_1 - \sin^2\alpha_2|} \tag{5.26}$$

在颗粒碰撞发生时刻，两个直径一定的球形颗粒相切接触，只要确定以上三个角度之中的任两个角度，就可以确定两个球体碰撞的具体接触位置。用 MC 方法来考虑颗粒碰撞时，采用的是随机方法，认为两个球形颗粒在碰撞瞬间的具体接触位置是随机的，所以，假设 α_1 和 α_2 为 0～360°之间满足均匀分布的两个随机数，根据方程(5.26)求出 α_3，那么就可以确定颗粒碰撞的具体接触位置，从而可以进行坐标系转换。

(6) 异数目权值虚拟颗粒的碰撞动力学。

在 MMC 算法中，参与碰撞/凝并的两颗虚拟颗粒的数目权值不一定相等，文

献[47]提出了数目权值相等的两颗粒在碰撞之后速度计算的方法，并不完全适合于异数目权值虚拟颗粒的情况，而 Nanbu 等[48]则发展了一种异数目权值的荷电等离子体颗粒的碰撞动力学模型，并不在本章所考虑的范围之内。本章发展了一种新的异数目权值虚拟颗粒群策略时的碰撞动力学模型。

当虚拟颗粒 i 和 j 发生碰撞时，假设虚拟颗粒 i 的数目权值 w_i 大于虚拟颗粒 j 的数目权值，则虚拟颗粒 i 中的 w_j 颗实际颗粒与虚拟颗粒 j 中的 w_j 颗实际颗粒两两配对发生碰撞事件，实际碰撞事件的数目为 w_j，虚拟颗粒 i 中的另外 $(w_i - w_j)$ 颗实际颗粒没有参与碰撞事件。此时，可以把虚拟颗粒 i 拆分为两颗虚拟颗粒 q 和 k，虚拟颗粒 q 的数目权值为 w_j，虚拟颗粒 k 的数目权值为 $(w_i - w_j)$，虚拟颗粒 q 和 k 的其他状态参数仍然继承虚拟颗粒 i 的值，虚拟颗粒 q 与虚拟颗粒 j 的碰撞为数目权值相等的两虚拟颗粒之间的碰撞，而虚拟颗粒 k 不参与碰撞过程，如图 5.4 所示。所以，此时数目权值不等的两虚拟颗粒之间的碰撞事件可以分解为数目权值相等的两虚拟颗粒 q 和 j 的碰撞及不参与碰撞的虚拟颗粒 k 的运动。本章认为，一次数目权值不等的两虚拟颗粒之间的碰撞事件之后，虚拟颗粒 q 和 j 的速度按照数目权值相等的两虚拟颗粒的碰撞动力学模型演化，而虚拟颗粒 k 不参与碰撞过程，其状态参数仍然与虚拟颗粒 i 的相同。把虚拟颗粒 q 取代虚拟颗粒 i 的位置，而新添加一颗虚拟颗粒 k 到虚拟颗粒数列中。所以，一次碰撞事件之后，虚拟颗粒的总数目将加 1。一次碰撞事件后，虚拟颗粒 i、j、k 的数目权值 w、尺度 v_p 和速度 $\boldsymbol{u}_p$ 为：

(1) 当 $(w_i)_{old} = (w_j)_{old}$ 时，

$$\begin{cases}(w_i)_{new} = (w_i)_{old}, \quad (v_{pi})_{new} = (v_{pi})_{old}, \quad (\boldsymbol{u}_{pi})_{new} = \boldsymbol{u}_{pi}^* \\ (w_j)_{new} = (w_j)_{old}, \quad (v_{pj})_{new} = (v_{pi})_{old}, \quad (\boldsymbol{u}_{pj})_{new} = \boldsymbol{u}_{pj}^*\end{cases}$$

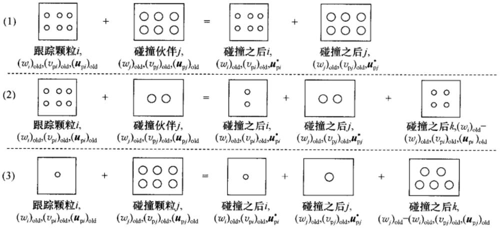


图 5.4 异数目权值虚拟颗粒间的碰撞示意图

(2) 当 $(w_i)_{\mathrm{old}}>(w_j)_{\mathrm{old}}$时，

$$\begin{cases}(w_i)_{\mathrm{new}}=(w_j)_{\mathrm{old}}, & (v_{\mathrm{p}i})_{\mathrm{new}}=(v_{\mathrm{p}i})_{\mathrm{old}}, & (\boldsymbol{u}_{\mathrm{p}i})_{\mathrm{new}}=\boldsymbol{u}_{\mathrm{p}i}^{*}\\(w_j)_{\mathrm{new}}=(w_j)_{\mathrm{old}}, & (v_{\mathrm{p}j})_{\mathrm{new}}=(v_{\mathrm{p}i})_{\mathrm{old}}, & (\boldsymbol{u}_{\mathrm{p}i})_{\mathrm{new}}=\boldsymbol{u}_{\mathrm{p}j}^{*}\\(w_k)_{\mathrm{new}}=(w_i)_{\mathrm{old}}-(w_j)_{\mathrm{old}}, & (v_{\mathrm{p}k})_{\mathrm{new}}=(v_{\mathrm{p}i})_{\mathrm{old}}, & (\boldsymbol{u}_{\mathrm{p}k})_{\mathrm{new}}=(\boldsymbol{u}_{\mathrm{p}i})_{\mathrm{old}}\end{cases}$$

(3) 当$(w_i)_{\mathrm{old}}<(w_j)_{\mathrm{old}}$时，

$$\begin{cases}(w_i)_{\mathrm{new}}=(w_i)_{\mathrm{old}}, & (v_{\mathrm{p}i})_{\mathrm{new}}=(v_{\mathrm{p}i})_{\mathrm{old}}, & (\boldsymbol{u}_{\mathrm{p}i})_{\mathrm{new}}=\boldsymbol{u}_{\mathrm{p}i}^{*}\\(w_j)_{\mathrm{new}}=(w_i)_{\mathrm{old}}, & (v_{\mathrm{p}j})_{\mathrm{new}}=(v_{\mathrm{p}j})_{\mathrm{old}}, & (\boldsymbol{u}_{\mathrm{p}j})_{\mathrm{new}}=\boldsymbol{u}_{\mathrm{p}j}^{*}\\(w_k)_{\mathrm{new}}=(w_j)_{\mathrm{old}}-(w_i)_{\mathrm{old}}, & (v_{\mathrm{p}k})_{\mathrm{new}}=(v_{\mathrm{p}j})_{\mathrm{old}}, & (\boldsymbol{u}_{\mathrm{p}k})_{\mathrm{new}}=(\boldsymbol{u}_{\mathrm{p}j})_{\mathrm{old}}\end{cases}\tag{5.27}$$

式中：$\boldsymbol{u}_{\mathrm{p}i}^{*}$和$\boldsymbol{u}_{\mathrm{p}j}^{*}$分别为具有等数目权值的两颗粒 i 和 j 的碰撞后线速度[依照公式(5.25)计算]。当虚拟颗粒数目 N_{f} 超过初始值 2 倍($2N_{\mathrm{f0}}$)时，随机抛弃($N_{\mathrm{f}}-N_{\mathrm{f0}}$)颗虚拟颗粒，使得虚拟颗粒数目恢复初始值，同时虚拟颗粒的数目权值各自增倍，即采用“阶梯式常数目方案”恢复虚拟颗粒数目。

3) 单颗粒事件和零颗粒事件的考虑

破碎、冷凝/蒸发、沉积等单颗粒事件和成核等零颗粒事件的机理非常复杂，但是从算法方面而言，则比双颗粒动力学事件——碰撞或凝并要简单得多。

首先对网格进行遍历，对于某网格 l，把其作为整体系统，模拟其内可能发生的单颗粒事件和零颗粒事件，即进行零维颗粒群平衡模拟，具体过程可以参照4.6 节中的相关内容，在此不再重复。需要注意的一点是，这些动力学事件的核模型与空间关联，虽然同一个网格 l 内认为各向同性，但是不同网格内可能互不相同。

5.3　多维多重 Monte Carlo 算法的验证

5.3.1　计算工况

本章通过模拟细微颗粒(零惯性颗粒)和粗重颗粒(极大惯性颗粒)的运动来分别检验三维系统中考虑颗粒碰撞/凝并的 MMC 算法。

1) 细微颗粒流

简单剪切流中的轻颗粒完全随流体运动，颗粒速度等于颗粒周围流体的速度。如果颗粒大小相同，颗粒直径为 d_{p}，颗粒数密度为 n_{p}，流体的剪切率为 γ(单位为 s^{-1})，颗粒均匀分布在计算域中，计算域在三个方向都是周期性的。颗粒的剪切运动在 x、y 方向上是周期性的，在 z 方向上是非周期性的。颗粒间的平均碰撞/凝并率是指在单位时间、单位体积的计算域中颗粒间发生碰撞/凝并的次数，它是描述颗粒碰撞/凝并的一个关键参数，对于细微颗粒如气溶胶、燃烧源 PM 的碰撞/凝

并等尤为重要。Wang 等[49]得到这种工况中细微颗粒的平均碰撞率 N_c（量纲为 $m^{-3}\cdot s^{-1}$）为

$$N_c = 0.5n_p^2\frac{4\gamma d_p^3}{3}\left(1-\frac{3\pi d_p}{16l}\right) \tag{5.28}$$

式中：l 是颗粒在 z 方向上的分布范围，这里 $l=\pi$。两颗尺度均为 d_p 的颗粒的碰撞核为 $\beta=\frac{4\gamma d_p^3}{3}\left(1-\frac{3\pi d_p}{16l}\right)$。初始条件见表 5.1。

表 5.1　细微颗粒流和粗重颗粒流的初始条件

初始参数	细微颗粒流	粗重颗粒流
边界条件	$0<x<2\pi, 0<y<2\pi, 0.5\pi<z<1.5\pi$	$0<x<2\pi, 0<y<2\pi, 0<z<2\pi$
网格划分	16^3	16^3
剪切速率，γ/s^{-1}	60	—
颗粒速度分布	$u(x,y,z)=\gamma z, v(x,y,z)=0, w(x,y,z)=0$	Maxwell 分布，$\langle u'^2_p\rangle\approx 3$
实际颗粒总数目，N_0	10^5	10^5
虚拟颗粒总数目，N_{f0}	8×10^4	8×10^4
颗粒尺度，d_p	0.01	0.01
时间步长，$\Delta t/s$	0.001	0.005
演变时间长度，T_1/s	0.1	0.5

2）粗重颗粒流

同样考虑单分散性颗粒，计算域三个方向都周期性，颗粒运动也在三个方向是周期性的。当颗粒均匀分布且速度满足麦克斯韦分布时，Abrahamson[50]得到平均碰撞率为

$$N_c = 0.5n_p^2 d_p^2\left(\frac{16}{3}\pi\langle u'^2_p\rangle\right)^{\frac{1}{2}} \tag{5.29}$$

式中：$\langle u'^2_p\rangle$是颗粒脉动速度的均方值。两颗尺度均为 d_p 的颗粒的碰撞核为 $\beta=d_p^2\left(\frac{16}{3}\pi\langle u'^2_p\rangle\right)^{\frac{1}{2}}$，而尺度分别为 d_{pi}和 d_{pj}的两颗粒的凝并核为

$$\beta_{ij} = \left[\frac{16}{3}\pi(E_{pi}+E_{pj})\right]^{\frac{1}{2}}\frac{(d_{pi}+d_{pj})^2}{4} = \left(\frac{6}{\pi}\right)^{\frac{1}{6}}(E_{pi}+E_{pj})^{\frac{1}{2}}\frac{(v_{pi}^{\frac{1}{3}}+v_{pj}^{\frac{1}{3}})^2}{4} \tag{5.30}$$

式中：E_{pi}为虚拟颗粒 i 的单位质量湍动能，即

$$E_{pi} = \frac{1}{2}({u_{pi,x}}^2+{u_{pi,y}}^2+{u_{pi,z}}^2)$$

粗重颗粒的模拟的初始条件如表 5.1 所示。表中计算区域、颗粒大小、颗粒速度均为无量纲化参数。

另外，由于本 MMC 算法的描述对象为颗粒群，为了使比较对象更有针对性和简单起见，本节的数值模拟均不计算流体相及颗粒与流体之间的两相耦合，此时可以剥离复杂的流体相模型、流体-颗粒相互作用的模型，只关注于多维空间中颗粒相的相互作用。本章选择的两种工况正好都可以剥离流体相细节信息，把焦点集中于颗粒相及颗粒-颗粒碰撞/凝并之上。

第 k 个时间步长（Δt_k）中虚拟颗粒 i 的位置如下计算：$(\boldsymbol{x}_{pi})_k=(\boldsymbol{x}_{pi})_{k-1}+(\boldsymbol{u}_{pi})_{k-1}\Delta t_k$，而第 k 个时间步长末端虚拟颗粒 i 的速度$(\boldsymbol{u}_{pi})_k$依据碰撞/凝并动力学确定。

在本节中，非均匀网格采用的是渐密模式，相邻网格宽度的比值为 1.04；如不特别指明，数值模拟中都采用均匀网格。两种工况中，MMC 算法中的虚拟颗粒数目都取为 80 000，平均每个网格中虚拟颗粒数目大约 20 个，实际颗粒数目大约为 25 个。实际上，虚拟颗粒和实际颗粒数目的比值完全可以更小一些，只是由于直接数值模拟(DNS)方法在普通 PC 上难以模拟数目更多的实际颗粒，且 MMC 算法要求每个网格中虚拟颗粒数目应该达到 $O(10)\sim O(10^2)$。尽管如此，数目较少的虚拟颗粒代表数目众多的实际颗粒，所带来的计算代价的节省仍然很大。

即使是对于细微颗粒流和粗重颗粒流这种特殊工况，对于颗粒尺度分布的空间演变过程、颗粒场的动力学演变过程等也难以采用理论分析解描述，本节选择直接数值模拟方法的结果来验证多维 MMC 算法，DNS 方法由于其对湍流场细节信息的跟踪而具有公认的计算精度。对颗粒碰撞和凝并进行模拟的 DNS 方法的详细描述请参照文献[1]、[51]～[53]。

5.3.2 考虑颗粒碰撞的多维多重 Monte Carlo 算法的验证

1）细微颗粒流和粗重颗粒流的平均碰撞率

定义平均碰撞率的模拟值 N_c 及其相对误差为

$$N_c=\frac{\text{总演变时间 } T_1 \text{ 内计算域内颗粒间碰撞的总次数}}{\text{总演变时间 } T_1\times\text{计算域体积 } V}\tag{5.31}$$

$$\text{相对误差}=\frac{N_c-N_{c,\text{theory}}}{N_{c,\text{theory}}}\tag{5.32}$$

对于两种计算工况，利用 MMC 算法及 DNS 方法均对颗粒平均碰撞率进行了数值模拟，并与理论值比较，结果如表 5.2 所示。DNS 方法的结果证明，发生二元碰撞的两颗颗粒在一个时间步长范围内确实有可能不位于同一网格内，所以在 MC 方法考虑颗粒碰撞的算法当中，不能仅仅局限虚拟碰撞伙伴与跟踪颗粒都位于中心网格，而应扩展到包括中心网格的 3^d 个网格当中去选择。但是，发生在中心网格中的碰撞概率远远大于发生在其他任一网格的概率，甚至远远大于发生在所有相邻网格中的概率之和。为了体现该事实，首先判断虚拟碰撞伙伴所在的网

格(即当前跟踪的虚拟颗粒在当前时间步长末端所处的网格)应该是较好的办法，本章提出的判断准则对于均匀和非均匀网格都适用，基本上与 DNS 方法的细观模拟结果吻合，已经具备一定的精度。应该指出，工程计算中的网格划分较稀疏，导致一个时间步长内颗粒运动距离远远小于网格的长度，所以绝大部分颗粒的碰撞都发生在同一网格内，故以往研究者的简化处理也基本准确。

表 5.2 颗粒平均碰撞率的 Monte Carlo 方法结果、DNS 方法结果及理论值的比较

结果		平均碰撞率 /($m^{-3}\cdot s^{-1}$)	相对误差/%	碰撞发生在同一网格的概率
细微颗粒流	MMC 算法结果	25.047	−3.498	0.557
	DNS 方法结果	26.039	0.323	0.473
	理论值	25.955	—	—
粗重颗粒流	MMC 算法结果（均匀网格）	59.083	2.619	0.960
	DNS 方法结果（均匀网格）	57.584	0.014	0.956
	MMC 算法结果（非均匀网格）	60.067	4.327	0.957
	DNS 方法结果（非均匀网格）	57.666	0.156	0.955
	理论值	57.576	—	—

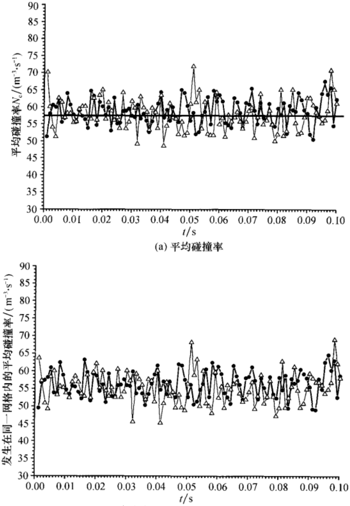
图 5.5 为在每个时间步长内 MMC 算法与 DNS 方法对于颗粒碰撞率的实时比较。计算工况为粗重颗粒流，均匀网格。整体而言，MMC 算法的结果是令人满意的。

2）碰撞工况中颗粒相动力场的细观比较

为了进一步检查 MMC 算法对于颗粒群细节信息(包括颗粒尺度分布的空间分布、颗粒速度场等)，把能够反映颗粒碰撞细节信息的 DNS 方法模拟结果作为标准，对于完全相同的计算工况，用 MMC 算法的颗粒场模拟结果与 DNS 方法模拟结果作比较，这里选择表 5.1 中的粗重颗粒流作为对照工况。为了进行细节信息的定量比较，对定截面上的颗粒数密度、颗粒平均速度和颗粒湍动能的时间平均值和特定时刻值进行比较，这里定截面为 z 方向的中心截面($z=\pi$)，特定时刻选取 $t=0.25$s，即经历 50 个时间步长的时刻。数值模拟结果如图 5.6 所示。由图 5.6 可知 MMC 算法与 DNS 方法的结果均符合非常好，进一步验证了 MMC 算法不仅在平均碰撞率这个宏观指标上表现合格，对于细节的颗粒场信息也能够模拟很好，这充分验证了该多维 MMC 算法对于颗粒碰撞过程的描述精度。

刘敏等[54]建立了一套定量评价稠密两相气固流中颗粒聚集现象的方法，如采用 PSD 的相关系数来衡量流动的相似性，用颗粒体积分数的概率分布和颗粒分布曲线来描述流场细节等。这里借鉴这种定量评价方法来比较多维 MMC 算法和 DNS 方法所各自描述的颗粒场宏观参数和细节参数，以评判 MMC 算法的准确性和合理性。

定义颗粒场某个参数 φ 的 DNS 方法的模拟结果和 MMC 算法的模拟结果的相关系数为



(a) 平均碰撞率

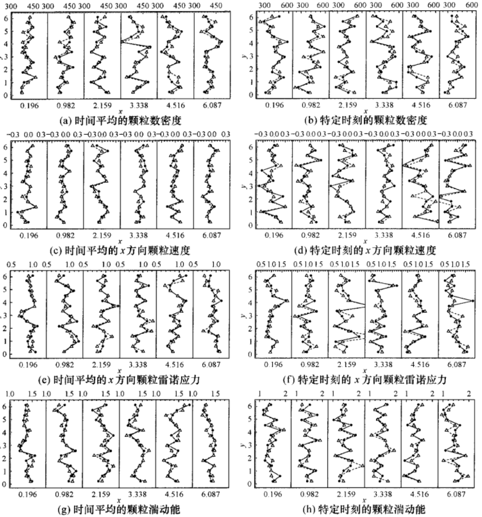
(b) 发生在同一网格内的平均碰撞率

图 5.5 多维 MMC 算法与 DNS 方法模拟的颗粒平均碰撞率的实时比较

—•— MMC 算法； —△— DNS 方法； —— 理论解

$$\rho=\frac{\sum_{i=1}^{N_{\text{cell}}}(\varphi_i^{\text{DNS}}-\overline{\varphi^{\text{DNS}}})(\varphi_i^{\text{MMC}}-\overline{\varphi^{\text{MMC}}})}{\left[\sum_{i=1}^{N_{\text{cell}}}(\varphi_i^{\text{DNS}}-\overline{\varphi^{\text{DNS}}})^2\sum_{i=1}^{N_{\text{cell}}}(\varphi_i^{\text{MMC}}-\overline{\varphi^{\text{MMC}}})^2\right]^{\frac{1}{2}}} \tag{5.33}$$

式中：N_{cell}为控制容积总数目；φ_i^{DNS} 和$\overline{\varphi^{\text{DNS}}}$分别为 DNS 方法模拟结果中、第 i 个控制容积中参数 φ 的值和整个计算区域内参数 φ 的平均值；φ_i^{MMC} 和$\overline{\varphi^{\text{MMC}}}$则为 MMC 算法模拟结果的相应值。



(a) 时间平均的颗粒数密度　(b) 特定时刻的颗粒数密度

(c) 时间平均的x方向颗粒速度　(d) 特定时刻的x方向颗粒速度

(e) 时间平均的x方向颗粒雷诺应力　(f) 特定时刻的x方向颗粒雷诺应力

(g) 时间平均的颗粒湍动能　(h) 特定时刻的颗粒湍动能

图 5.6　考虑碰撞的 MMC 与 DNS 模拟的颗粒场结果细观比较

-•- MMC 算法；　-▵- DNS 方法

相关系数表征了相同条件下，不同模型和算法对颗粒场某个参数 φ 模拟结果的整体相似程度。表 5.3 为几个参数的相关系数的计算结果，其中 n_p 为颗粒数密度，$\bar{u}_p$ 为 x 方向颗粒速度，k_p 为颗粒湍动能。可知，相关系数均达到较高值。

表 5.3　单分散性颗粒场的相关系数

参数 φ	相关系数(时间平均值)	相关系数(特定时刻)
n_p	0.8260 875	0.723 066
$\bar{u}_p$	0.804 022	0.717 803
k_p	0.813 013	0.720 102

颗粒数密度概率分布 $f(N_p)$ 定义为颗粒数密度为 N_p 的计算区域体积与整个计算域体积的比例，它可以整体评估颗粒分布的稀疏情况，图 5.7 为时间平均的 $f(N_p)$，MMC 算法模拟结果与 DNS 方法结果高度吻合，说明两种算法均较为精确地在宏观方面描述了不均匀颗粒场。值得注意的是，即使初始时刻假设颗粒场均匀分布，随着碰撞的进行，颗粒场将呈现出非均匀特征，图 5.7 中 $f(N_p)$ 基本符合正态分布。

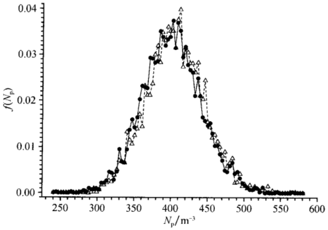


图 5.7　颗粒数密度概率分布

---△--- DNS；　—●— Monte Carlo

以上数值模拟结果表明 MMC 算法及时间尺度的选取、DSMC 方法相对应的颗粒碰撞动力学、虚拟碰撞颗粒所在控制容积的判断准则等算法是合理的、正确的。

在计算代价方面，对于均匀网格下粗重颗粒流的工况，同一台微机上，改进的 DNS 方法[51,52]的计算代价为 296s，而多维 MMC 算法则为 68s。计算代价的大幅度降低一方面来源于 MMC 算法跟踪比实际颗粒数目少的虚拟颗粒，另一方面来源于在考虑颗粒碰撞方面，MMC 算法基于随机过程来判断碰撞事件是否发生、选择虚拟碰撞伙伴、确定碰撞位置，而 DNS 方法却需要得到全部的确定信息，显然，前者要省时得多。不仅如此，相比较于那些耦合了碰撞算法的随机轨道模型或确定性轨道模型（如 Sommerfeld 的模型[42]），由于跟踪虚拟颗粒，MMC 算法的计算代价也要小一些，而且实际颗粒数目越多，计算代价方面的优势越明显。

5.3.3　考虑颗粒凝并的多维多重 Monte Carlo 算法的验证

1）粗重颗粒流的平均凝并率

多维 MMC 算法所预测的凝并工况中粗重颗粒场结果与 DNS 方法结果进行了比较。图 5.8 为平均碰撞/凝并率随时间的变化。平均凝并率随时间不断减少，

这主要是因为颗粒数目浓度(即颗粒数密度)越来越小的缘故。显然,本算法所预测的平均凝并率结果与DNS方法结果符合较好,证明本算法较好地描述了凝并过程的细节信息。

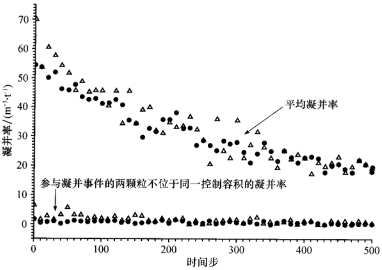


图 5.8　粗重颗粒流的平均凝并率

● MMC 算法；△ DNS 方法

2) 粗重颗粒流中颗粒尺度分布的时间演变

图 5.9(a)为颗粒总数目(N_p)、颗粒几何平均尺度(d_{pg})和几何标准偏差(σ_{pg})等几个统计量的比较,N_p 随时间延长而不断减少,d_{pg} 随时间延长而不断增加,由于凝并过程中保持质量守恒,所以 N_p 减少的速率和 d_{pg} 增加的速率基本相等。而

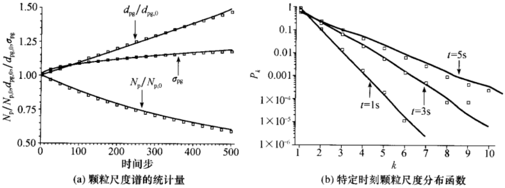


图 5.9　粗重颗粒流中颗粒尺度分布的时间演变

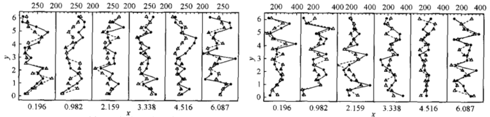
—— MMC 算法；▫ DNS 方法

σ_{pg}随时间推进而逐渐增加，越来越偏离 1，表明颗粒尺度之间的差异越来越大，越来越趋向于多分散性。图 5.9(b)为几个特定时刻颗粒尺度分布函数，其中纵坐标 P_k 表示体积为 v_k($v_k=kv_0$，v_0 为颗粒初始尺度，k 为整数)的颗粒所占数目比例。图 5.9 中 MMC 算法结果与 DNS 方法结果之间良好的吻合性充分证明了 MMC 算法在三维空间坐标系统中高精度地描述了颗粒尺度分布的时间演变过程。

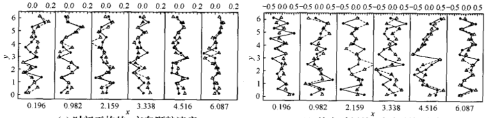
3) 凝并工况中颗粒相的动力场的细观比较

图 5.10(a)～(b)为特定截面(z 方向中心截面，$z=\pi$)上第一类颗粒(颗粒体积为 v_0)的数目浓度的时间平均值和特定时刻(第 250 个时间步长时刻，$t=2.5$s)值。时间平均值基本围绕 250 脉动，而特定时刻值基本围绕 200 扰动，这是因为凝并过程中颗粒数密度的衰减速率不一致的缘故，衰减速率取决于凝并核和颗粒数目浓度，随着时间的推进，衰减速率越来越小。图 5.10(c)～(h)中颗粒 x 方向速度、x 方向颗粒雷诺应力、颗粒湍动能等的 DNS 方法模拟结果与 MMC 算法的结果基本符合，可见 MMC 算法能够较好地描述颗粒尺度分布的空间扩散和颗粒动力场的细节信息。应该注意到，考虑凝并的 MMC 算法对于颗粒场(包括颗粒数目浓度、速度、湍动能等)的模拟精度要低于考虑碰撞的 MMC 算法的精度，主要原因在于：随着凝并过程的演化，颗粒尺度谱越来越宽，而模拟颗粒总数目不变，使得分配到每个颗粒类的统计样本越来越少，从而导致了 MMC 算法的统计误差。

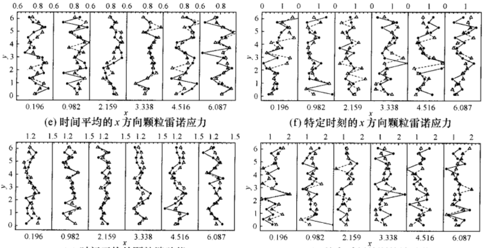
同样计算工况，MMC 算法的计算代价为 150s，而 DNS 方法的计算代价为 823s。较少的计算代价一方面来源于较少的模拟颗粒，另一方面来源于随机过程对凝并的处理。



(a) 时间平均的颗粒数密度　　(b) 特定时刻的颗粒数密度



(c) 时间平均的 x 方向颗粒速度　　(d) 特定时刻的 x 方向颗粒速度



(e) 时间平均的x方向颗粒雷诺应力　(f) 特定时刻的x方向颗粒雷诺应力

(g) 时间平均的颗粒湍动能　(h) 特定时刻的颗粒湍动能

图 5.10　考虑凝并的 MMC 算法与 DNS 方法模拟的颗粒场结果细观比较

—•— Monte Carlo 算法；　--▵-- DNS 方法

5.4 小　　结

本章的主要特点是建立颗粒群平衡模拟和四向耦合多相流模拟的联系，在描述零维空间系统的改进的多重 Monte Carlo 算法的基础上、耦合描述两相湍流场的欧拉-拉格朗日模型、综合考虑颗粒碰撞、凝并、破碎、冷凝/蒸发、成核、沉积等动力学事件，紧紧抓住颗粒尺度分布这个关键参数，描述其时间和空间演变过程，所构建的新算法不仅仅拓展了颗粒群平衡模拟的范畴，而且完善和丰富了四向耦合两相湍流模型及其数值模拟，有望为四向耦合的两相湍流模型和颗粒群平衡模拟提供一个高精度、高效率的数值描述方案。

多维 MMC 算法存在如下几个显著特点：①反映了发生二元碰撞/凝并的两颗颗粒有可能不位于同一网格的事实；②描述颗粒动力学演变过程的多维 MMC 算法与描述两相流场的数值模型在时间驱动的框架下、通过时间步长的限定和引入网格划分技术而实现无缝耦合；③采用随机过程来判断动力学时间的发生、寻找碰撞/凝并伙伴、确定碰撞位置等，在满足足够的数值计算精度的前提下，大大减少了计算代价；④在多维空间系统中把虚拟颗粒数目保持在一定范围之内。

采用本章发展的多维 MMC 算法对细微颗粒流和粗重颗粒流中颗粒碰撞和凝并过程进行了描述，模拟结果与直接数值模拟结果进行比较。平均碰撞率和平均凝并率的模拟结果与理论计算值和 DNS 方法结果都符合很好，颗粒场的细节信息如浓度场、速度场等与 DNS 方法符合很好，充分证明了该算法的计算精度。

实际上，MMC 算法由于能够得到颗粒的轨道经历效应和历史效应等，故能准确模拟颗粒碰撞和凝并，即使是相对颗粒体积分数很小的情况(5.3 节和 5.4 节中细微颗粒流和粗重颗粒流的体积分数分别为 0.134%和 0.067%)；也能准确模拟颗粒碰撞/凝并之后的平均速度、脉动速度、速度关联、颗粒数密度等。另外，MMC 算法可以进而扩展到考虑非弹性碰撞、由于碰撞而导致的破碎等事件；还可以方便地耦合进入两相流模型中，直接从气相模型中取得气相场的各种信息，用于颗粒相的求解及颗粒动力学演变过程的描述。需要强调的是，在本算法中，为了达到一定的计算精度，每个控制容积内需要一定数目的虚拟颗粒构成一个较大的样本空间，才能减少统计误差和随机误差。并且，MMC 算法需要预先设定碰撞/凝并核模型。这些模型对于计算结果的影响至关重要，复杂工况中这种核模型的构建有赖于精细的数值模拟(如直接数值模拟[55~57])、严密的理论分析[58~60]和精确的实验研究[61]。

值得注意的是，由于在一个时间步长 Δt 内颗粒的运动与颗粒的动力学演变过程(碰撞和凝并等)是解耦的，所以求解描述颗粒运动数值方法(如求解拉格朗日 Langevin 方程的 MC 方法等)可以与多维 MMC 算法解耦，这种算法结构非常有利于多维 MMC 算法扩展应用于各种复杂工况下的多维颗粒群平衡模拟和四向耦合两相湍流模型。如多重 Monte Carlo 算法同样可以与描述颗粒轨道运动的随机性轨道模型或确定性轨道模型等耦合起来，而这些颗粒相湍流模型又可以与其他连续相湍流模型耦合起来。

参考文献

[1] 李瑞霞，柳朝晖，贺铸，等. 各向同性湍流内有限惯性颗粒碰撞的直接数值模拟研究. 力学学报，2006，38(1)：25—32.

[2] Ramkrishna D, Mahoney A W. Population balance modeling. Promise for the future. Chemical Engineering Science, 2002, 57(4): 595—606.

[3] Settumba N, Garrick S C. A comparison of diffusive transport in a moment method for nanoparticle coagulation. Journal of Aerosol Science, 2004, 35(1): 93—101.

[4] Aristizabal F, Munz R J, Berk D. Modeling of the production of ultra fine Aluminium particles in rapid quenching turbulent flow. Journal of Aerosol Science, 2006, 37(2): 162—186.

[5] Wen Z, Yun S, Thomson M J, et al. Modeling soot formation in turbulent kerosene/air jet diffusion flames. Combustion and Flame, 2003, 135(3): 323—340.

[6] Kalani A, Christofides P D. Nonlinear control of spatially inhomogenous aerosol processes. Chemical Engineering Science, 1999, 54(13-14): 2669—2678.

[7] Kalani A, Christofides P D. Simulation, estimation and control of size distribution in aerosol processes with simultaneous reaction, nucleation, condensation and coagulation. Computers & Chemical Engineering, 2002, 26(7-8): 1153—1169.

[8] Kazakov A, Frenklach M. Dynamic modeling of soot particle coagulation and aggregation: Implementation with the method of moments and application to high-pressure laminar premixed flames. Combustion and Flame, 1998, 114(3-4): 484—501.

[9] Balthasar M, Mauss F, Knobel A, et al. Detailed modeling of soot formation in a partially stirred plug flow reactor. Combustion and Flame, 2002, 128(4): 395—409.

[10] Balthasar M, Mauss F, Wang H. A computational study of the thermal ionization of soot particles and its effect on their growth in laminar premixed flames. Combustion and Flame, 2002, 129(1-2): 204—216.

[11] Balthasar M, Frenklach M. Detailed kinetic modeling of soot aggregate formation in laminar premixed flames. Combustion and Flame, 2005, 140(1-2): 130—145.

[12] Zucca A, Marchisio D L, Barresi A A, et al. Implementation of the population balance equation in CFD codes for modelling soot formation in turbulent flames. Chemical Engineering Science, 2006, 61(1): 87—95.

[13] Falk L, Schaer E. A PDF modelling of precipitation reactors. Chemical Engineering Science, 2001, 56(7): 2445—2457.

[14] Jeong J I, Choi M. Analysis of non-spherical polydisperse particle growth in a two-dimensional tubular reactor. Journal of Aerosol Science, 2003, 34(6): 713—732.

[15] Lockwood F C, Yousif S. A model for the particulate matter enrichment with toxic metals in solid fuel flames. Fuel Processing Technology, 2000, 65-66(1): 439—457.

[16] Kim D, Gautam M, Gera D. Parametric studies on the formation of diesel particulate matter via nucleation and coagulation modes. Journal of Aerosol Science, 2002, 33(12): 1609—1621.

[17] Kim D H, Gautam M, Gera D. Modeling nucleation and coagulation modes in the formation of particulate matter inside a turbulent exhaust plume of a diesel engine. Journal of Colloid and Interface Science, 2002, 249(1): 96—103.

[18] Wen J Z, Thomson M J, Park S H, et al. Study of soot growth in a plug flow reactor using a moving sectional model. Proceedings of the Combustion Institute, 2005, 30(1): 1477—1484.

[19] Lu S Y, Lin H C, Lin C H. Modeling particle growth and deposition in a tubular CVD reactor. Journal of Crystal Growth, 1999, 200(3-4): 527—542.

[20] Nere N K, Ramkrishna D. Solution of population balance equation with pure aggregation in a fully developed turbulent pipe flow. Chemical Engineering Science, 2006, 61(1): 96—103.

[21] Garrick S C, Lehtinen K E J, Zachariah M R. Nanoparticle coagulation via a Navier-Stokes/nodal methodology: Evolution of the particle field. Journal of Aerosol Science, 2006, 37(5): 555—576.

[22] Campos F B, Lage P L C. A numerical method for solving the transient multidimensional population balance equation using an Euler-Lagrange formulation. Chemical Engineering

Science,2003,58(12):2725—2744.

[23] Qamar S,Ashfaq A,Warnecke G,et al. Adaptive high-resolution schemes for multidimensional population balances in crystallization processes. Computers and Chemical Engineering,2007,31(10):1296—1311.

[24] Dorao C A,Jakobsen H A. Application of the least-squares method for solving population balance problems in R^{d+1}. Chemical Engineering Science,2006,61(15):5070—5081.

[25] Dorao C A,Jakobsen H A. Time-space-property least squares spectral method for population balance problems. Chemical Engineering Science,2006,62(5):1323—1333.

[26] Hollander E D,Derksen J J,Bruinsma O S L,et al. A numerical study on the coupling of hydrodynamics and orthokinetic agglomeration. Chemical Engineering Science,2001,56(7):2531—2541.

[27] Kolodko A,Sabelfeld K,Wagner W. A stochastic method for solving Smoluchowski's coagulation equation. Mathematics and Computers in Simulation,1999,49(1-2):57—79.

[28] Sabelfeld K,Kolodko A. Stochastic Lagrangian models and algorithms for spatially inhomogeneous Smoluchowski equation. Mathematics and Computers in Simulation,2003,61(2):115—137.

[29] Balthasar M,Kraft M. A stochastic approach to calculate the particle size distribution function of soot particles in laminar premixed flames. Combustion and Flame,2003,133(3):289—298.

[30] Singh J,Balthasar M,Kraft M,et al. Stochastic modeling of soot particle size and age distributions in laminar premixed flames. Proceedings of the Combustion Institute,2005,30(1):1457—1465.

[31] Zhao B,Yang Z W,Johnston M V,et al. Measurement and numerical simulation of soot particle size distribution functions in a laminar premixed ethyleneoxygen-argon flame. Combustion and Flame,2003,133(1-2):173—188.

[32] 周力行. 多相湍流反应流体力学. 北京:国防工业出版社,2002.

[33] 柳朝晖. 湍流气粒两相流的 SOM-PDF 输运方程模型和 PDPA 实验研究[博士学位论文]. 武汉:华中科技大学,2002.

[34] 赵海波. 湍流两相流的速度联合 PDF 输运方程模型及其数值模拟[硕士学位论文]. 武汉:华中科技大学,2002.

[35] Gibson M M,Launder B E. Ground effects on pressure fluctuations in the atmospheric boundary layer. Journal of Fluid Mechanics,1987,86(3):491—511.

[36] Craft T,Launder B E. New wall-reflection model applied to the turbulent impinging jet. AIAA Journal,1992,30(12):2970—2972.

[37] Crespo A,Andres A,Granados L,et al. Modeling of turbulence dissipation for gas-particle flows//Proc. 4th International Conference on Multiphase Flow. New Orleans:CD-ROM,2001.

[38] Simonin O,Deutsch E,Minier J P. Eulerian prediction of the fluid/particle correlated mo-

tion in turbulent two-phase flows. Applied Scientific Research, 1993, 51(1-2): 275—283.

[39] Simonin O. Continuum modelling of dispersed turbulent two-phase flows. Technical Von Karman Institute for Fluid Dynamic: Brussels, 1996.

[40] 赵海波，柳朝晖，郑楚光. 颗粒扩散的三个效应的分析及其数值模拟. 热科学与技术，2003, 2(4): 347—351.

[41] Crowe C T, Sharma M P, Stock D E. The particle source in cell (PSI-CELL) model for gas droplet flows. ASME Journal of Fluids Engineering, 1977, 99(2): 325—331.

[42] Sommerfeld M. Validation of a stochastic Lagrangian modelling approach for inter-particle collisions in homogeneous isotropic turbulence. International Journal of Multiphase Flow, 2001, 27(10): 1829—1858.

[43] Ho C A, Sommerfeld M. Modelling of micro-particle agglomeration in turbulent flows. Chemical Engineering Science, 2002, 57(15): 3073—3084.

[44] Tsuji Y, Tanaka T, Yonemura S. Cluster patterns in circulating fluidized beds predicted by numerical simulation (discrete particle model versus two-fluid model). Powder Technology, 1998, 95(3): 254—264.

[45] 陶文铨. 数字传热学(第 2 版). 西安：西安交通大学出版社，2001.

[46] 陶文铨. 计算传热学的近代进展. 北京：科学出版社，2000.

[47] Lun C K K. Numerical simulation of dilute turbulent gas-solid flows. International Journal of Multiphase Flow, 2000, 26(10): 1707—1736.

[48] Nanbu K, Yonemura S. Weighted particles in coulomb collision simulations based on the theory of a cumulative scattering angle. Journal of Computational Physics, 1998, 145(2): 639—654.

[49] Wang L P, Wexler A S, Zhou Y. On the collision rate of small particles in isotropic turbulence. I. Zero-inertia case. Physics of Fluids, 1998, 10(1): 266—276.

[50] Abrahamson J. Collision rates of small particles in a vigorously turbulent fluid. Chemical Engineering Science, 1975, 30(11): 1371—1379.

[51] 陈胤密. 均匀湍流内有限惯性颗粒碰撞率的直接模拟[硕士学位论文]. 武汉. 华中科技大学，2004.

[52] 陈胤密，柳朝晖，郑楚光. 颗粒碰撞的直接模拟算法. 计算物理，2004, 21(5): 421—426.

[53] 李瑞霞. 均匀湍流内湍流-布朗颗粒碰撞的直接模拟研究[硕士学位论文]. 武汉：华中科技大学，2006.

[54] 刘敏，张会强，郭印诚，等. 稠密气固流动中颗粒聚集的定量评价. 工程热物理学报，2004, 25(5): 804—806.

[55] Wang L P, Wexler A S, Zhou Y. Statistical mechanical description and modelling of turbulent collision of inertial particles. Journal of Fluid Mechanics, 2000, 415: 117—153.

[56] Reade W C, Collins L R. A numerical study of the particle size distribution of an aerosol undergoing turbulent coagulation. Journal of Fluid Mechanics, 2000, 415: 45—64.

[57] Reade W C, Collins L R. Effect of preferential concentration on turbulent collision rates.

Physics of Fluids,2000,12(10):2530—2540.

[58] Zaichik L I,Simonin O,Alipchenkov V M. Two statistical models for predicting collision rates of inertial particles in homogeneous isotropic turbulence. Physics of Fluids,2003,15(10):2995—3005.

[59] Wang L P,Wexler A S,Zhou Y. Statistical mechanical descriptions of turbulent coagulation. Physics of Fluids,1998,10 (10):2647—2651.

[60] Alipchenkov V M,Zaichik L I. Particle collision rate in turbulent flow. Fluid Dynamics,2001,36(4):608—618.

[61] 蔡毅,赵海亮,由长福,等. 颗粒碰撞率的实验研究. 工程热物理学报,2004,25(6):974—976.

6 颗粒群平衡模拟的应用和展望

自然和工程领域存在大量的离散系统，这决定着颗粒群平衡模拟有着非常广泛的应用范畴。迄今为止，颗粒群平衡模拟已经在燃烧领域、化工领域、气溶胶领域、大气物理化学领域、核科学领域、纳米颗粒领域、甚至宇宙星系领域取得了大量有用的结果。本章给出了我们在气溶胶领域、除尘领域和湍流气-固两相流领域运用颗粒群平衡模拟的三个实例。我们采用零维颗粒群平衡模拟定量描述了降雨过程中气溶胶颗粒的湿沉降过程（采用零维多重 Monte Carlo 算法）、紧凑型混合颗粒收集器对燃煤锅炉飞灰颗粒的脱除过程（采用事件驱动常体积法），采用多维颗粒群平衡模拟揭示了颗粒碰撞与两相湍流场之间强烈的相互耦合关系（采用多维多重 Monte Carlo 算法）。之后我们对颗粒群平衡模拟的发展趋势、在复杂系统中的应用等进行了展望。

6.1 降雨过程中气溶胶湿沉降的数值模拟

从排放源（如燃煤锅炉、机动车、自然扬尘等）逃逸出来的一次颗粒物以及在大气环境中转化生成的二次颗粒物，是大气物理化学中通常所说的气溶胶（固体气溶胶）的重要组成部分，可以在自然环境中以干沉降或湿沉降的方式去除，一般来说，降雨降雪等湿沉降过程对气溶胶的去除效果非常明显，雨雪之后晴朗的天空和清新的空气正是人们所追求的。

大气环境中气溶胶的湿沉降过程异常复杂，涉及雨滴与气溶胶颗粒的相互作用、气溶胶颗粒之间的相互作用、气溶胶颗粒与气态污染物之间的相互作用、气溶胶颗粒在大气中的迁移扩散等，对其进行理论描述和数值模拟的研究工作非常困难，目前的主要工作都是建立在大量的简化或者经验公式之上。显然，对降雨过程中气溶胶的湿沉降进行理论描述是揭示气溶胶自然去除的重要基础，也能为发展高效可吸入颗粒物去除技术提供借鉴作用。

对自然环境中气溶胶的干/湿沉降过程进行定量描述的过程，实际上也就是得到气溶胶颗粒尺度分布函数的动力学演变的过程。本节首先利用第 4 章发展的随机算法（本节采用多重 Monte Carlo 算法）数值模拟了封闭空间中气溶胶颗粒的自然沉降过程，然后重点描述降雨对气溶胶的湿去除过程，并分析了降雨类型和雨滴尺度分布对气溶胶湿去除效果的影响。

6.1.1 降雨对气溶胶湿去除过程的数学模型的建立

降雨过程对大气环境中的气溶胶颗粒物的去除过程也称为云下清除或气溶胶颗粒物的湿沉降。气溶胶湿沉降的过程就是尺度较小的气溶胶与雨滴碰撞被捕集的过程。气溶胶湿去除过程非常复杂，受多种外部因素（如气溶胶尺度谱、雨滴尺度谱、降雨量、雨强、甚至环境温度、气溶胶和雨滴的物理和化学属性等）和内部因素（如气溶胶和雨滴的碰撞区间等）的影响。采用清除系数（scavenging coefficient）来研究气溶胶的湿沉降是一种较为直观简便且被广泛使用的方法[1~5]。清除系数$\Lambda(d_p)$表示尺度为d_p的气溶胶被雨滴所清除的速率（s^{-1}）。Mircea 等[1]得到了清除系数与雨强（rainfall intensity）的指数形式的经验表达式[$\Lambda=aEJ^b$，其中a和b为两个取决于当地气溶胶尺度谱和降雨类型的经验系数，J为雨强（mm/h），E为碰撞效率]，Mircea 等[2]通过数值分析得到了清除系数与雨强的线性形式的经验表达式（$\Lambda=a+bJ$，其中a和b为与当地气溶胶尺度谱和降雨类型相关的两经验系数）。彭红等[3]分析了碰撞效率、雨滴尺度谱和气溶胶尺度谱等对清除系数的影响，得到了我国两广地区降雨过程中的经验平均碰撞效率，以及不同组分气溶胶清除系数与雨强的经验关系式。这些工作通过对清除系数进行微物理参数化（microphysical parameterization）建模，虽然成功地从整体上分析了气溶胶群的湿沉降效果与外部因素的关系，但研究对象是整个气溶胶群，无法分析特定尺度气溶胶的湿沉降过程，也无法得到气溶胶尺度谱随时间的演变过程，即无法得到足够的信息以定量描述降雨过程中气溶胶的湿沉降。实际上，随着气溶胶不断被雨滴所清除，气溶胶的尺度分布将发生变化，可以利用气溶胶尺度谱的时间演变过程来量化气溶胶在降雨过程中的湿沉降过程，此时需要建立考虑气溶胶湿沉降的颗粒群平衡方程（PBE）。

为了简化所研究问题的复杂性，气溶胶的湿沉降过程基于如下简化或假设[6,7]：①降雨过程稳定；②雨滴尺度远远大于气溶胶尺度，即使捕集了气溶胶颗粒，其尺度也无明显变化，且不考虑雨滴之间的凝并、冷凝/蒸发、成核等，故认为雨滴尺度分布始终保持不变；雨滴认为是规则球形；③不考虑气溶胶之间的碰撞凝并、冷凝/蒸发、成核等；气溶胶认为是规则球形。此时，描述气溶胶尺度分布的时间演变过程的数学模型可以通过考虑湿沉降的颗粒群平衡方程（PBE）来建立[7]：

$$\frac{\partial n_p(d_p,t)}{\partial t}=-\Lambda(d_p)n_p(d_p,t) \tag{6.1}$$

式中：$n_p(d_p,t)$为气溶胶尺度分布函数（$\mu m^{-1}\cdot m^{-3}$），表示时刻t、尺度为d_p（μm）的气溶胶在单位体积内（m^3）的数目浓度；$\Lambda(d_p)$是尺度为d_p的气溶胶颗粒的清除系数，或称为沉积核。

可以把各种气溶胶湿沉降机制囊括进入清除系数的模型中。清除系数描述了气溶胶与雨滴碰撞而被捕集的过程，其表达式为[7]

$$\Lambda(d_p) = \int_{D_{d,\min}}^{D_{d,\max}} K(d_p, D_d) E(d_p, D_d) n_d(D_d) \mathrm{d}D_d \tag{6.2}$$

式中：$n_d(D_d)$为雨滴尺度分布函数($mm^{-1} \cdot m^{-3}$)；$K(d_p, D_d)$为碰撞核(collision kernel)或捕集核(collection kernel)，表示气溶胶颗粒(d_p)与雨滴颗粒(D_d)在同一时刻几何轨道发生交叉而碰撞的概率，$K(d_p, D_d) = \pi D_d^2 |U(D_d) - U(d_p)|/4$，$U(D_d)$和$U(d_p)$分别为雨滴($D_d$)和气溶胶($d_p$)的末速度；雨滴末速度可以采用以下三段式公式近似计算[8]：

$$\begin{cases} U(D_d) = 30.75 D_d^2 \times 10^6 & D_d < 100\mu\text{m} \\ U(D_d) = 38 D_d \times 10^3 & 100\mu\text{m} < D_d < 1000\mu\text{m} \\ U(D_d) = 133.046 D_d^{0.5} & D_d > 1000\mu\text{m} \end{cases} \tag{6.3}$$

并且$U(D_d)$的最大值为 9.17m/s；气溶胶末速度如下计算[9]：

$$U(d_p) = \frac{\rho_p d_p^2 g C_c}{18\mu_a} \tag{6.4}$$

式中：ρ_p 为气溶胶的密度(kg/m^3)；μ_a 为大气的动力黏度[$kg/(m \cdot s)$]；g 为重力加速度；C_c 为 Cunningham 滑移修正系数。

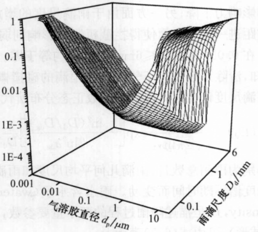
$E(d_p, D_d)$为碰撞效率，表示实际发生的碰撞次数与理论上将要发生的碰撞次数的比例，这是由于湍流扩散、布朗扩散、范德华力、热泳、静电吸附等因素所引起的气溶胶和雨滴的轨迹滑移，所以碰撞效率可以集中体现各种气溶胶湿沉降机制，如最为重要的布朗扩散、拦截、惯性碰撞和静电捕集等机制。各种外部因素(如气溶胶尺度谱、雨滴尺度谱、气溶胶和雨滴本身的物理化学特性、雨水含水量甚至环境温度等)均影响气溶胶的湿去除效果。Mircea 等[1]认为碰撞效率为常数，这是不恰当的。Slinn[10]从 Navior-Stocks 方程出发、使用无量纲分析并耦合实验数据得到了碰撞效率的半经验表达式：

$$\begin{aligned} E(d_p, D_d) = & \left\{ \frac{4}{Re \cdot Sc} \left[1 + 0.4 Re^{\frac{1}{2}} Sc^{\frac{1}{3}} + 0.16 Re^{\frac{1}{2}} Sc^{\frac{1}{2}} \right] \right\}_{\text{Brownian diffusion}} \\ & + \left\{ 4 \frac{d_p}{D_d} \left[\frac{\mu_a}{\mu_w} + (1 + 2Re^{\frac{1}{2}}) \frac{d_p}{D_d} \right] \right\}_{\text{interception}} \\ & + \left\{ \left(\frac{\rho_w}{\rho_p} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{St - S^*}{St - S^* + \frac{2}{3}} \right)^{\frac{3}{2}} \right\}_{\text{inertial impaction}} \end{aligned} \tag{6.5}$$

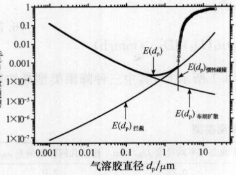
式中：Re 为基于雨滴半径的雨滴雷诺数，$Re = D_d U(D_d) \rho_a / (2\mu_a)$，其中 ρ_a 为大气密度；Sc 为气溶胶的 Schmidt 数，$Sc = \mu_a / (\rho_a D_{diff})$，其中 D_{diff} 为气溶胶的扩散系数，$D_{diff} = k_b T C_c / (3\pi \mu_a d_p)$，其中 T 为大气环境的绝对温度(K)；ρ_w 和 μ_w 分别为雨滴

密度和动力黏度；St 为气溶胶的 Stokes 数，$St=2\tau_p U(D_d)C_c/D_d$，τ_p 为气溶胶的弛豫时间尺度，$\tau_p=\rho_p d_p{}^2/(18\mu_a)$；$S^*$ 为一个无量纲参数，$S^*=[1.2+(1/12)\ln(1+Re)]/[1+\ln(1+Re)]$。需要注意的是，当 $St\leqslant S^*$ 时，认为碰撞效率 $E(d_p,D_d)$ 的惯性碰撞部分等于零，且 $0\leqslant E(d_p,D_d)\leqslant 1$。对于通常大气环境中的降雨过程，$T=296.15\text{K}$，$\rho_a=1.193\text{kg/m}^3$，$\mu_a=1.832\ 45\times10^{-5}\ \text{kg/(m}\cdot\text{s)}$，$\rho_w=997.45\ \text{kg/m}^3$，$\mu_w=9.591\times10^{-4}\ \text{kg/(m}\cdot\text{s)}$，$\rho_p=2270\text{kg/m}^3$（燃煤飞灰的典型材料密度），$\lambda=6.73\times10^{-8}\text{m}$。

依据式(6.5)，把气溶胶尺度和雨滴尺度作为 2 个自变量，可以得到碰撞效率的曲线，如图 6.1(a)所示；而雨滴直径固定为 1mm 时和气溶胶尺度固定为 0.5μm 时碰撞效率的变化曲线分别如图 6.1(b)和图 6.1(c)所示。

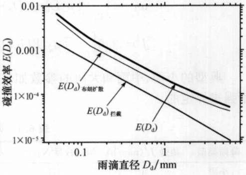


(a) $E(d_p,D_d)$ 和 d_p 及 D_d 的依存关系



(b) D_d=1mm, $E(d_p,D_d)$-d_p

▫ $E(d_p)$；—— $E(d_p)_{拦截}$；
—— $E(d_p)_{布朗扩散}$；━━ $E(d_p)_{惯性碰撞}$



(c) d_p=0.5μm, $E(d_p,D_d)$-D_d

━━ $E(D_d)$；—— $E(D_d)_{布朗扩散}$；—— $E(D_d)_{拦截}$

图 6.1 碰撞效率 $E(d_p,D_d)$ 与气溶胶尺度 d_p 和雨滴尺度 D_d 的关系

由图 6.1(a)和图 6.1(b)可见，布朗扩散机制主要对尺度很小的气溶胶($<0.01\mu m$)起作用，这些气溶胶在布朗力的作用下做无序运动，被尺度大得多的雨滴捕集而被湿去除，气溶胶越小，碰撞效率越高。如果液滴的流线正好与气溶胶的轨迹交叉，则气溶胶被液滴拦截，这种拦截机制对于任何尺度的气溶胶均起作用，但对湿去除效果的贡献取决于气溶胶与雨滴的尺度比值，一般来说该机制对任何尺度的气溶胶的影响能力均较小。对于尺度较大的气溶胶($>2\mu m$)而言，其与雨滴的碰撞主要是由于惯性作用，气溶胶越大则碰撞效率越高。中间尺度气溶胶($>0.01\mu m$且$<2\mu m$)的湿去除效果很差，通常称之为“Greenfield gap”[11]；这是由于布朗扩散机制和惯性碰撞机制均对其影响很小，加之拦截机制也对其并无显著影响，所以碰撞效率非常低。由图 6.1(a)和图 6.1(c)可见，当 $d_p=0.5\mu m$ 时，随着雨滴尺度的不断增加，碰撞效率将不断衰减，这一方面是由于雨滴雷诺数的增加导致布朗扩散机制的影响力下降；另一方面由于雨滴尺度的增加导致气溶胶尺度与雨滴尺度之间的差距进一步加大而使得拦截机制的影响削弱；图 6.1(c)中碰撞效率的惯性碰撞部分在 $0.05mm \leqslant D_d \leqslant 6mm$ 范围内均等于零。

由公式(6.2)可知，清除系数取决于气溶胶与雨滴的碰撞概率、碰撞效率和雨滴尺度谱。实际的雨滴尺度谱也可由拟合的对数正态分布所代表[12]：

$$n_d(D_d) = \frac{N_d}{\sqrt{2\pi}\ln\sigma_{dg}}\exp\left[-\frac{\ln^2(D_d/D_{dg})}{2\ln^2\sigma_{dg}}\right]\frac{1}{D_d} \tag{6.6}$$

式中：N_d、D_{dg}和 σ_{dg}分别为雨滴总数目、雨滴几何平均尺度和雨滴几何标准偏差。

本节假设雨滴尺度谱不随时间而变动。雨水含水量(water content，w_l)和雨强(precipitation intensity，J)是描述降雨过程的两个重要参数，均与雨滴尺度谱有关(假设雨滴为规则球形)，可由式(6.7)表示[1]。

$$\begin{aligned} w_l &= \int_{D_d} \frac{\pi}{6}\rho_w D_d^3 n_d(D_d)\mathrm{d}D_d \\ J &= 3.6\int_{D_d} \frac{\pi}{6}\rho_w D_d^3 U(D_d) n_d(D_d)\mathrm{d}D_d \quad (\mathrm{mm/h}) \end{aligned} \tag{6.7}$$

典型的小雨、中雨和大雨的参数如表 6.1 所示[12]，其中三种降雨类型是按照雨强来界定的。

表 6.1 降雨类型

降雨类型	雨强 J/(mm/h)	雨滴数目 N_d/m^{-3}	雨滴几何平均尺度 D_{dg}/mm	雨滴几何标准偏差 σ_{dg}
小雨	1	172	0.72	2.0
中雨	10	285.45	1.22	2.0
大雨	100	473.73	2.08	2.0

依据公式(6.2)，可以得到典型的小雨、中雨和大雨时清除系数与气溶胶尺度

的关系，如图 6.2 所示。可见，几种降雨条件下，清除系数与气溶胶尺度的依存曲线非常类似于特定雨滴尺度时碰撞效率与气溶胶尺度的依存曲线[见图 6.1(b)]，这表明碰撞效率对清除系数的影响非常明显。

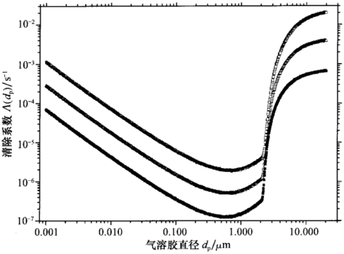


图 6.2　雨滴尺度谱满足对数正态分布时清除系数与气溶胶尺度的关系

▪ 小雨；　—▴— 中雨；　—▫— 大雨

6.1.2　多重 Monte Carlo 算法对颗粒湿沉降事件的特殊处理

通过求解方程(6.1)可以定量获取降雨过程中气溶胶尺度分布(ASD)的细节信息。如果 ASD 满足单分散性或特殊函数形式(如指数、对数正态和伽玛函数等)的分布，且清除系数 $\Lambda(d_p)$为颗粒尺度 d_p 的简单函数[如 $\Lambda(d_p)=ad_p^c+bd_p^d+\cdots$]，则方程(6.1)存在指数形式的理论分析解，如 Jung 等[7]利用矩方法得到了受布朗扩散机制所主导的、呈对数正态分布的、亚微米尺度的气溶胶颗粒湿沉降过程的理论分析解。但是，一方面这些理论解无法直接提供气溶胶几何平均尺度、气溶胶总数目、气溶胶几何标准偏差(分散度)等关键信息；另一方面，对于某些具有复杂分布的多分散性气溶胶群或者 $\Lambda(d_p)$较为复杂，则方程(6.1)为一个典型的部分积分微分方程，不仅很难在数学上得到理论解，而且利用普通的数值方法计算时或者难以求解，或者存在较大的离散误差。

Jung 等[6]发展矩方法在全气溶胶尺度范围内求解 GDE，计算效率高，可定量得到 ASD 的时间演变过程，但是矩方法存在如下局限性：①ASD 和雨滴尺度分布(RSD)必须为特殊函数形式，如对数正态分布和 Gamma 分布等；②必须作一些假设或简化，以使得碰撞效率的模型成为气溶胶尺度的指数的函数；③假设在演变过程中 ASD 始终具有“自保持”特点；④所建立的矩方程组极为复杂，不易求解。这

些局限性限制了其应用范围。另外，分区法[13]也广泛用于气溶胶动力学，并具有一定的计算精度和恰当的计算代价，但它算法复杂，且由于不能得到颗粒的轨道经历效应和历史效应而难以处理复杂颗粒演变过程。

描述气溶胶湿沉降过程的难点在于该过程与复杂的 ASD 和 RSD 均相关，而对 ASD 和 RSD 进行数值积分和微分必将耗费大量计算代价或造成一定的数值误差。实际上，气溶胶群和雨滴群均为离散系统，而 MC 方法具有天生的离散特性，特别适合于离散系统以及其所发生的离散湿沉降事件。本节即利用 MMC 算法来描述气溶胶湿沉降过程，并利用其进行数值模拟，以揭示典型降雨类型和雨强等外部因素对各个特定尺度气溶胶的湿去除效果的影响，并分析雨滴尺度分布对气溶胶湿去除效果的影响。

MMC 算法首先引入加权虚拟颗粒(此处称为“虚拟气溶胶”)的概念来代表数量众多的实际气溶胶群。对于气溶胶的湿沉降事件，可以理解为尺度 d_p 的气溶胶颗粒与所有尺度的雨滴颗粒发生凝并的总概率，所以该事件的核模型(即清除系数)的计算中需要对 RSD 进行积分，这种积分计算可能耗费大量的计算代价或者造成一定的数值误差，甚至完全无法求解。为了避免这个积分计算，类似于虚拟气溶胶，这里引入加权的“虚拟雨滴”的概念，生成虚拟雨滴的步骤也完全类似于虚拟气溶胶的生成步骤。虚拟雨滴 i 拥有一个数目权值 w_{di}，其尺度为 D_{di}，代表相应数目、相应尺度的实际雨滴，虚拟雨滴总数目为 N_{df}。此时清除系数的计算如下：

$$\begin{aligned}\Lambda(d_p) &= \int_{D_{d,\min}}^{D_{d,\max}} \frac{\pi D_d^2}{4} \mid U(D_d) - U(d_p) \mid E(d_p, D_d) n_d(D_d) \mathrm{d}D_d \\ &= \sum_{i=1}^{N_{df}} \left[\frac{\pi D_{di}^2}{4} \mid U(D_{di}) - U(d_p) \mid E(d_p, D_{di}) w_{di} \right] \end{aligned} \tag{6.8}$$

随着湿沉降事件的发生，气溶胶尺度分布将发生变化，故最小湿沉降时间亦将随之发生改变，因此 MMC 算法中时间步长必须实时设置，而不能设为定值。如果每次时间步长的设置中，对于每颗虚拟气溶胶的清除系数的计算都利用方程(6.8)，即每一次都对所有虚拟雨滴进行遍历，则每次时间步长的计算所耗费的计算代价将是 $O(N_{pf} \times N_{df})$。实际上，气溶胶湿沉降的一个特点是气溶胶的尺度范围只可能缩减，所以只在初始时刻利用方程(6.8)计算每一个虚拟气溶胶的清除系数，并保存这些清除系数，在以后清除系数的计算中，找到对应尺度的、保存好的清除系数，即可作为当前虚拟气溶胶的清除系数。这样每次时间步长的计算所耗费的计算代价仅为 $O(N_{pf})$。

这样，通过同时考虑雨滴群和气溶胶群两个离散系统，分别引入加权虚拟气溶胶和虚拟雨滴的概念，来实现高精度和高效率的数值求解。

6.1.3 描述气溶胶湿沉降的多重 Monte Carlo 算法的验证

对于主要受布朗扩散所主导的小尺度气溶胶，Jung 等[7]简化其碰撞效率如下：

$$E_{\mathrm{JD}}(d_p, D_d) = 2\left(\frac{\sqrt{3}\pi}{4Pe}\right)^{\frac{2}{3}}\left[\frac{(1-\alpha)(3\sigma+4)}{J+\sigma K}\right]^{\frac{1}{3}} \tag{6.9}$$

式中：α 为液滴的体积分数或填充密度(packing density)；σ 为水和空气的黏性系数比值，$\sigma=\mu_w/\mu_a$；Pe 为贝克利数(Peclet number)，$Pe=D_d U(D_d)/D_{\mathrm{diff}}$；这里简单地认为雨滴末速度 $U(D_d)=130D_d^{0.5}$，且认为气溶胶末速度 $U(d_p)=0$；$J=1-6\alpha^{1/3}/5+\alpha^2/5$，$K=1-9\alpha^{1/3}/5+\alpha+\alpha^2/5$。本节中，$T=296.15\mathrm{K}$，$\mu_a=1.83245\times10^{-5}\mathrm{kg/(m\cdot s)}$，$\mu_w=9.591\times10^{-4}\mathrm{kg/(m\cdot s)}$，$\lambda=6.73\times10^{-8}\mathrm{m}$。

认为气溶胶初始时刻的尺度分布可以由对数正态函数所代表：

$$n_p(d_p, t) = \frac{N_p}{\sqrt{2\pi}\ln\sigma_{pg}}\exp\left[-\frac{\ln^2(d_p/d_{pg})}{2\ln^2\sigma_{pg}}\right]\frac{1}{d_p} \tag{6.10}$$

式中：N_p、d_{pg}和 σ_{pg}分别为 t 时刻气溶胶数目浓度($\mathrm{m^{-3}}$)、几何平均尺度(μm)和几何标准偏差；$d_{pg}=(6v_{pg}/\pi)^{1/3}$，其中 v_{pg}为气溶胶的几何平均体积($\mu\mathrm{m}^3$)。也认为雨滴尺度分布服从对数正态分布，如公式(6.6)所示。

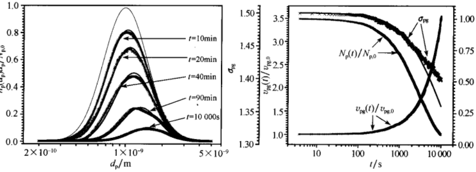
对于尺度范围在 $d_p<0.05\mu\mathrm{m}$ 和 $0.05<d_p<1.0\mu\mathrm{m}$ 的气溶胶，Jung 等[7]分别得到了湿沉降过程中气溶胶尺度分布时间演变的理论分析解，把其作为检验考虑湿沉降的 MMC 算法计算精度的标准。计算条件见表 6.2，其中湿沉降特征时间尺度为 $\tau_{\mathrm{sca}}=1/\Lambda(d_{pg,0})$；Case1 和 Case2 中 RSD 的参数为 $N_d=10^5\mathrm{m^{-3}}$，$D_{dg}=0.1\mathrm{mm}$，$\sigma_{dg}=1.2$。

表 6.2 计算条件

算例	$N_{p,0}/\mathrm{m^{-3}}$	$d_{pg,0}/\mu\mathrm{m}$	$\sigma_{pg,0}$	$\tau_{\mathrm{sca}}/\mathrm{s}$	N_{pf}	N_{df}	T_L/s
Case1	10^6	0.001	1.5	3221.80	3000	3000	10^4
Case2	10^6	0.1	1.5	1 213 571.72	3000	3000	10^7

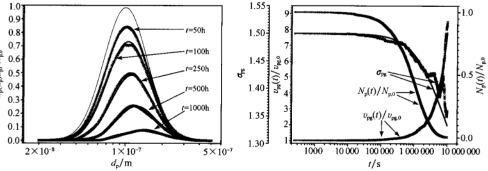
图 6.3 和图 6.4 分别为 Case1 和 Case2 中 MMC 模拟结果与理论分析解的比较，其中图 6.3(a)和图 6.4(a)分别为 Case1 和 Case2 中 ASD 在 5 个特定时刻处的曲线，图 6.3(b)和图 6.4(b)分别为 Case1 和 Case2 中气溶胶总数目(N_p)、几何平均体积(v_{pg})和几何标准偏差(σ_{pg})的时间演变过程。如图 6.3(b)和图 6.4(b)所示，随着时间推移，N_p 急剧降低，表明大量气溶胶被降雨过程湿去除；而 v_{pg}随时间急剧升高，这是由于尺度较小的气溶胶在布朗扩散机制的主导下更容易被雨滴所去除的缘故；另外，降雨过程中 σ_{pg}不断减小并趋向于 1，这表明气溶胶尺度间的差异越来越小而趋于统一。对于 ASD 而言，如图 6.3(a)和图 6.4(a)所示，随着降雨

过程的延续，由于 N_p 不断减少，ASD 曲线的峰值不断降低；由于 v_{pg} 增大，峰的位置不断往右（大尺度气溶胶一侧）偏移；由于 σ_{pg} 减小，气溶胶尺度分布曲线越来越平缓。MMC 数值模拟结果与理论分析解符合很好。即使在 N_p 非常小的情况下（Case1 中 $t=10^4$s 处 $N_p=$ 81 080.9m^{-3}；Case2 中 $t=10^7$ 处 $N_p=$2565.9m^{-3}），MMC 模拟结果与理论分析解之间的偏差也非常小，只有 σ_{pg} 有少量误差。Case1 和 Case2 所耗费的计算时间分别为 25s 和 78s，其低计算代价适合工程计算。



(a) 特定时刻气溶胶尺度分布　　(b) N_p、d_{pg}和σ_{pg}的时间演变过程

图 6.3　Case1 中 MMC 模拟结果与理论分析解的比较
— 初始 ASD；— 理论分析解；× MMC 算法解



(a) 特定时刻气溶胶尺度分布　　(b) N_p、d_{pg}和σ_{pg}的时间演变过程

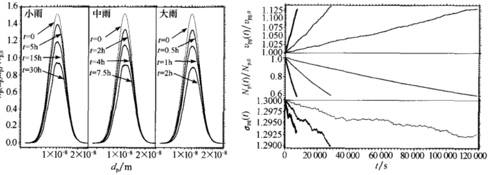
图 6.4　Case2 中 MMC 模拟结果与理论分析解的比较
— 初始 ASD；— 理论分析解；× MMC 算法解

6.1.4　降雨类型对气溶胶湿去除效果的影响

利用考虑湿沉降的 MMC 算法求解 GDE 方程(6.1)，可以得到不同气溶胶初始尺度谱、不同雨滴尺度谱（不同的降雨类型和雨强）时气溶胶尺度谱随时间演变的详细信息，包括不同时刻的气溶胶尺度谱曲线、气溶胶几何平均尺度、气溶胶几

何标准偏差等，从而考察不同降雨类型和雨水含水量或雨强对特定尺度的气溶胶的湿去除效果的影响。

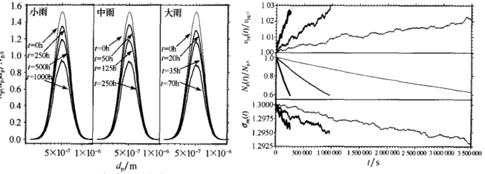
我们首先考察了不同类型的降雨过程对气溶胶的湿去除效果。初始时刻气溶胶的总数目 $N_{p,0}=10^6\text{m}^{-3}$，几何标准偏差 $\sigma_{pg,0}=1.3$，几何平均尺度 $d_{pg,0}$ 分别为 0.01μm（称为小尺度气溶胶）、0.5μm（称为中等尺度气溶胶）和 5μm（称为大尺度气溶胶）；雨滴尺度谱满足对数正态分布，小雨、中雨和大雨的雨强分别为 1mm/h、10mm/h 和 100mm/h（参见表 6.1）。几种典型的降雨类型中，小尺度气溶胶、中等尺度气溶胶和大尺度气溶胶的尺度分布曲线的动力学演变过程分别如图 6.5～图 6.7 所示，其中(a)为小雨、中雨和大雨过程中几个特定时刻处的气溶胶尺度谱曲线，(b)为小雨、中雨和大雨过程中气溶胶尺度谱的几个关键统计量［气溶胶的总数目 N_p、几何平均体积 $v_{pg}(=\pi d_{pg}^3/6)$ 和几何标准偏差 σ_{pg}］随时间的演变曲线。



(a) 气溶胶尺度谱　　(b) 气溶胶数目、平均尺度和几何标准偏差

— 小雨；— 中雨；— 大雨

图 6.5　不同降雨类型对小尺度气溶胶的湿去除过程



(a) 气溶胶尺度谱　　(b) 气溶胶数目、平均尺度和几何标准偏差

— 小雨；— 中雨；— 大雨

图 6.6　不同降雨类型对中等尺度气溶胶的湿去除过程

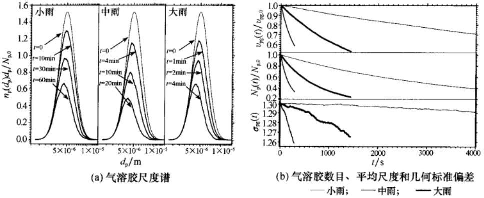


图 6.7　不同降雨类型对大尺度气溶胶的湿去除过程

对于 $d_{pg,0}=0.01\mu m$ 的气溶胶，主要受布朗扩散所主导而被雨滴所捕集，而且越小的气溶胶越易被捕集，所以，如图 6.5(b)所示，虽然气溶胶的总数目 N_p 不断减少，但气溶胶的几何平均体积 v_{pg} 不断增大，气溶胶尺度谱曲线不断偏移向粒径较大的一端。而且，雨强越大，N_p 下降的速率或 v_{pg} 上升的速率越快。图 6.5(a)中的数值模拟结果也表明，短时间的大雨(例如，2h)与长时间的中雨(如 7.5h)和更长时间的小雨(如 30h)捕集的气溶胶数目基本相同，这与 Garcia Nieto 等[14]的模拟结果定性符合。小尺度气溶胶的尺度谱(ASD)不断地往右边(尺度更大的气溶胶一侧)移动。对于 $d_{pg,0}=5\mu m$ 的大尺度气溶胶，如图 6.7 所示，则与小尺度气溶胶的湿去除过程正好相反，它们主要由于惯性作用与雨滴碰撞而被湿去除，气溶胶尺度越大，惯性则越大，也越易于与雨滴碰撞，所以尺度较大的气溶胶迅速被雨滴所清除；表现在图中为气溶胶总数目不断减少且气溶胶平均体积也不断减小，气溶胶尺度谱曲线逐渐偏移到粒径较小的一端，这表明尺度更大的气溶胶更容易也更高效地被雨滴所捕集。显然，由图 6.7 可知，大雨依次比中雨和小雨对大尺度气溶胶的湿去除效果更好一些；对于处于“Greenfield gap”区域的中等尺度气溶胶(本节中的 $d_{pg,0}=0.5\mu m$ 的气溶胶)，很难被降雨过程湿去除，这是因为这种尺度的气溶胶与任何尺度的雨滴颗粒之间的碰撞效率都较小的缘故。图 6.6 中的数值模拟结果表明，气溶胶颗粒的几何平均尺度基本保持常数，但是颗粒数目浓度不断减小。类似于大尺度气溶胶和小尺度气溶胶的湿去除，大雨依次比中雨和小雨更能有效地捕集中等尺度气溶胶。值得注意的是，不管是哪种降雨类型，任何尺度的气溶胶在湿去除过程中，其几何标准偏差均越来趋近于 1，这表明气溶胶尺度谱曲线越来越趋近于平坦，气溶胶尺度越来越趋近于均匀和单分散性。图 6.5～图 6.7 的结果与 Garcia Nieto 等[14]的结果能够达到定性符合。

同样的降雨类型对不同尺度的气溶胶有着不同的湿去除效果。为了达到同样的气溶胶湿去除效果，例如，为了使湿去除数目效率达到 40%，小雨对大尺度气溶

胶将耗时约 35min，对小尺度气溶胶将耗时约 33h，但是对中等尺度气溶胶将耗时约 1094h。同样，中雨和大雨也依次更有效地去除大尺度气溶胶、小尺度气溶胶和中等尺度气溶胶。

综上所述，对于任意尺度的气溶胶，大雨依次比中雨和小雨具有更好的湿去除效果，这是由于雨强的增加间接增加了雨水含水量，即单位体积内雨滴总体积（进而总表面积）增加，使得捕集气溶胶的机会增加；三种降雨类型对大尺度气溶胶的湿去除效果都要好于对小尺度气溶胶的湿去除效果；另外，三种降雨类型对于中等尺度气溶胶的清除效果均不理想，相比较而言，大雨的清除效果稍微好一些。这些数值模拟的结论与我们通常的日常认识相符合。以上结论也可以通过气溶胶清除系数来理解。因为对于不同的降雨类型，清除系数与气溶胶尺度之间存在不同的函数关系，而某尺度的气溶胶的清除系数表示该气溶胶被雨滴清除的速率，所以通过不同降雨类型或降雨过程时气溶胶尺度与清除系数之间的函数关系有利于从另外一个角度理解不同降雨类型对不同尺度气溶胶的湿去除效果。如图 6.2 所示，雨强的增加使得任何尺度的气溶胶的清除系数均增加，其中大尺度和小尺度气溶胶的清除系数增加尤为明显，只有直径在 2μm 左右的气溶胶的清除系数增加不明显，从而导致雨强越大，对小尺度和大尺度气溶胶的湿去除效果越好，而对中等尺度气溶胶没有明显的湿去除效果。另外，对于任何一种降雨类型，大尺度气溶胶的清除系数都要明显地依次大于小尺度和中等尺度气溶胶的清除系数，这也是为什么降雨对大尺度气溶胶的湿去除效果依次强于小尺度和中等尺度气溶胶的原因。

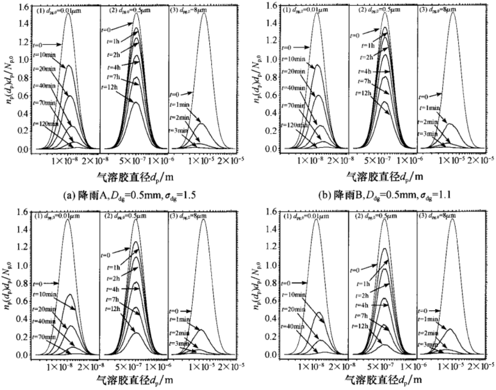
值得注意的是，对于小尺度和中等尺度气溶胶来说，其尺度谱的演变过程基本符合“自保持”曲线，即气溶胶尺度谱曲线在不同时刻仍然保持初始时刻的对数正态分布形式[如图 6.5(a)、图 6.6(a)所示]，但是对于大尺度气溶胶，其尺度谱并不严格保持“自保持”状态，这是由于清除系数在该气溶胶尺度范围内急剧上升的缘故。而 Jung 等[6]所采用的矩方法认为气溶胶尺度谱始终具有“自保持”曲线，这必将导致一定的数值误差。

6.1.5 雨滴尺度谱对气溶胶湿去除效果的影响

在降雨量 w_l（$=10\text{g/m}^3$）一定的情况，为了考察对数正态分布的雨滴谱对气溶胶湿去除效果的影响，通过变动雨滴几何平均尺度 D_{dg}（分别为 0.5mm 和 0.2mm）和雨滴几何标准偏差 σ_{dg}（分别为 1.1 和 1.5），利用 MMC 算法进行了数值模拟 ASD 的时间演变过程，此时初始 ASD 满足对数正态分布，$N_{p,0}$ 为 $10^6\ \text{m}^{-3}$、$\sigma_{pg,0}$ 为 1.3、$d_{pg,0}$ 分别为 0.01μm，0.5μm 和 8μm。对于对数正态分布的雨滴谱，其雨滴总数目 N_d 依据降雨量计算如下：

$$N_d = \frac{w_l}{\frac{\pi}{6}\rho_w d_{dg}^3 \exp\left(\frac{9}{2}\sigma_{dg}^2\right)} \tag{6.11}$$

图 6.8 展示了不同的 RSD 时几个特定时刻处的 ASD 曲线，而图 6.9 为气溶胶相对数目$[N_p(t)/N_{p,0}]$随时间的演变过程。为了方便表述，称具有 $D_{dg}=0.5\text{mm}$ 且 $\sigma_{dg}=1.5$ 的对数正态雨滴尺度分布的降雨过程为降雨 A，称 $D_{dg}=0.5\text{mm}$ 且 $\sigma_{dg}=1.1$ 的降雨过程为降雨 B，称 $D_{dg}=0.2\text{mm}$ 且 $\sigma_{dg}=1.5$ 的降雨过程为降雨 C，称 $D_{dg}=0.2\text{mm}$ 且 $\sigma_{dg}=1.1$ 的降雨过程为降雨 D；另外，称 $d_{pg,0}=0.01\mu\text{m}$ 的气溶胶群为小尺度气溶胶，称 $d_{pg,0}=0.5\mu\text{m}$ 气溶胶群为中等尺度气溶胶，称 $d_{pg,0}=8\mu\text{m}$ 气溶胶群为大尺度气溶胶。



(a) 降雨A, D_{dg}=0.5mm, σ_{dg}=1.5　　(b) 降雨B, D_{dg}=0.5mm, σ_{dg}=1.1

(c) 降雨C, D_{dg}=0.2mm, σ_{dg}=1.5　　(d) 降雨D, D_{dg}=0.2mm, σ_{dg}=1.1

图 6.8　不同的雨滴尺度分布下气溶胶尺度分布的时间演变过程

首先考察 σ_{pg}相同而 D_{dg}不同时气溶胶的湿去除情况。当 $\sigma_{dg}=1.5$ 时(对应于降雨 A 和降雨 C)，对于小尺度气溶胶，比较图 6.8(a)-(1)和图 6.8(c)-(1)中特定时刻的 ASD 曲线，可以发现，降雨 C 时 $t=70\text{min}$ 时的 ASD 曲线类似于降雨 A 时 $t=120\text{min}$ 时的 ASD 曲线，也就是说，70min 的降雨 C 就可以达到 120min 的降雨 A 相似的小尺度气溶胶湿去除效果。图 6.9-(1)中降雨 C 时 $N_p(t)/N_{p,0}$比降雨 A 时下降得更快，同样表明同一段时间内降雨 C 比降雨 A 清除了更多的小尺度气溶

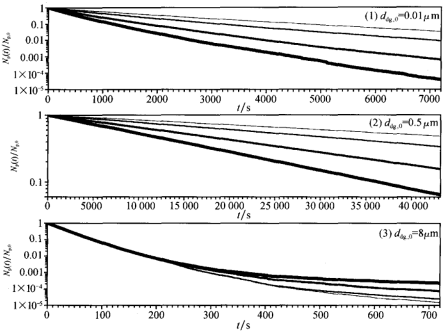


图 6.9　不同降雨过程中气溶胶相对数目的时间演变过程
—— 降雨 A；—— 降雨 B；—— 降雨 C；—— 降雨 D

胶；对于大尺度气溶胶，降雨 A 和 C 均在几分钟内就清除了几乎所有的气溶胶，图 6.8(a)-(3)和图 6.8(c)-(3)中相同时刻处的 ASD 曲线几乎相同，表明此时降雨 A 和 C 具有几乎相同的大尺度气溶胶湿去除效果。但是通过考察图 6.9-(3)，可以发现，相比较于降雨 C，降雨 A 时 $N_p(t)/N_{p,0}$ 下降得稍快一些，表明降雨 A 对大尺度气溶胶的湿去除效果稍稍优于降雨 C。对于中等尺度气溶胶，所有降雨过程对其的湿去除效果均不理想，需要非常长的降雨过程(12h)才能达到很短的降雨过程(20min)对小尺度气溶胶或更短的降雨过程(少于 1min)对大尺度气溶胶的相似的湿去除效果。

比较图 6.8(a)-(2)和图 6.8(b)-(2)中同样时刻处的 ASD 曲线以及图 6.9-(2)中 $N_p(t)/N_{p,0}$ 随时间演变的曲线，可发现降雨 C 具有比降雨 A 更好的中等尺度气溶胶湿去除效果。考察 σ_{dg} 均为 1.1 而 D_{dg} 不同的降雨过程(降雨 B 和降雨 D)对不同尺度气溶胶的湿去除情况，发现，相比较于降雨 D(D_{dg} = 0.2mm)，降雨 B(D_{dg} = 0.5mm)稍稍有利于大尺度气溶胶的湿沉降而明显不利于小尺度和中等尺度气溶胶的湿沉降。综合以上分析，有如下结论：在相同降雨量的情况下，雨滴几何平均尺度越小，越有利于小尺度和中等尺度气溶胶的湿沉降，而稍稍不利于大尺度气溶胶的湿沉降；另外，任何降雨过程对大尺度气溶胶的清除效果都依次好于

小尺度气溶胶和中等尺度气溶胶。

运用类似的方法论，可以考察 D_{dg} 相同而 σ_{dg} 不同时气溶胶的湿去除情况，可以得到如下结论：在相同的降雨量的情况下，雨滴几何标准偏差越小，越能有效地湿去除小尺度和中等尺度气溶胶，但是稍稍不利于大尺度气溶胶的湿沉降。

以上结论可以通过分析气溶胶的清除系数来解释。图 6.10 为四种降雨过程中气溶胶尺度与清除系数的关系。对于小尺度气溶胶而言，主要由于布朗扩散机制所主导而被雨滴清除。对于同样总质量的雨滴群，其 D_{dg} 越小，σ_{dg} 越小，如公式(6.11)所示，N_d 将越来越多，雨滴总表面积也将越来越大。故它们捕集小尺度气溶胶的几率也越大。中等尺度气溶胶主要受布朗扩散和拦截机制的共同作用而被雨滴清除，拦截机制所主导的碰撞效率（称为 E_2）取决于气溶胶尺度与雨滴尺度的比值（d_p/D_d），D_{dg} 越小，σ_{dg} 越小（即雨滴尺度越来越统一），则比值 d_p/D_d 越大，使得 E_2 越大；另外，根据上面的分析，D_{dg} 和 σ_{dg} 越小，布朗扩散机制所主导的碰撞效率（称为 E_1）也将越大；所以，综合起来，D_{dg} 和 σ_{dg} 越小，越有利于中等尺度气溶胶在布朗扩散和拦截机制的共同控制下被雨滴清除。对于大尺度气溶胶而言，主要受惯性碰撞机制所主导而被清除，布朗扩散和拦截机制对其清除过程的影响力仍然存在但是相对较弱。惯性碰撞机制所主导的碰撞效率（E_3）近似[6]等于（$1-0.9St^{-0.5}$），即与气溶胶颗粒的 Stokes 数（St）呈正相关关系。由于雨滴末速度采用三段式公式计算，E_3 与 D_d 可能正相关或负相关。当 $D_d<100\mu m$ 时，St 与 D_d 呈正相关关系，从而 E_3 与 D_d 呈正相关关系，所以此时较大的 D_{dg} 和 σ_{dg} 将导致较大的 E_3；而当 $D_d>1000\mu m$ 时，St 与 D_d 呈负相关关系，从而 E_3 与 D_d 也呈负相关关系，

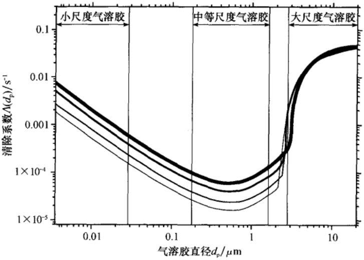


图 6.10 不同降雨过程中气溶胶尺度与清除系数的关系

—— 降雨 A； —— 降雨 B； —— 降雨 C； —— 降雨 D

此时较大的 D_{dg} 和 σ_{dg} 反而导致较小的碰撞效率。而气溶胶的清除系数不仅仅取决于碰撞效率，还与雨滴尺度分布等紧密相关[参见公式(6.2)]，几种因素共同作用的结果是，那些尺度较小的大尺度气溶胶($2\mu m<d_p<10\mu m$)的清除系数随着 D_{dg} 和 σ_{dg} 的增大而增大，如图 6.10 所示，这表明较大的 D_{dg} 和 σ_{dg} 有利于这些尺度较小的大尺度气溶胶的湿去除；而图 6.10 中那些尺度较大的大尺度气溶胶($d_p>10\mu m$)的清除系数随着 D_{dg} 和 σ_{dg} 的增大反而减小，这表明，较小的 D_{dg} 和 σ_{dg} 反而有利于它们的湿去除。应该注意到，对于大尺度气溶胶，其尺度越大，任何降雨过程中清除系数均越大。也应该注意到，大尺度气溶胶的清除系数依次比小尺度气溶胶和中等尺度气溶胶的清除系数大，而中等尺度气溶胶的清除系数最小，它们很难被雨滴捕集。

6.1.6 小结

我们采用颗粒群平衡模拟的方法定量描述了自然环境中可吸入颗粒物[大气物理化学中通常所说的(固态)气溶胶]的湿沉降过程。降雨过程对气溶胶的湿去除机制中，布朗扩散主导小尺度气溶胶的湿沉降，惯性碰撞控制大尺度气溶胶的湿沉降，而布朗扩散、惯性碰撞和拦截机制均对于中等尺度气溶胶的影响处于最低谷，导致降雨过程对于不同尺度气溶胶有着显著差异的湿去除效果。

为了参数化降雨湿去除气溶胶的过程，定量计算了雨滴和气溶胶的碰撞效率与它们尺度之间的依存关系，以及雨滴尺度谱满足对数正态分布时气溶胶的清除系数与其尺度的依存关系。但是，利用清除系数参数化气溶胶湿沉降过程的方法无法得到特定尺度气溶胶的湿沉降过程的细节信息。为此，本节采用随机算法(多重 Monte Carlo 算法)求解考虑气溶胶湿沉降的通用动力学方程，获得了气溶胶尺度谱时间演变的细节信息；随机算法的好处在于不需要进行任何公式方面的假设，对实际的雨滴尺度分布和气溶胶尺度分布也无任何限制，只要能够给出关键的清除系数模型，就能够描述任何工况中的气溶胶湿沉降过程。而 Jung 等[6]矩方法需要把碰撞效率简化成气溶胶尺度 d_p 的指数的函数，认为气溶胶尺度分布函数在演变过程中始终保持"自保持"的对数正态分布(实际过程中由于清除系数与气溶胶尺度之间强烈的非线性，"自保持"特性并不严格成立)，只能用于描述一些特定尺度范围、特定湿沉降机制的气溶胶湿沉降过程，但是并不适合于实际工况中的气溶胶湿沉降的描述。

我们利用随机算法考察了不同降雨类型对不同尺度气溶胶的湿去除效果，发现大雨对于任何尺度的气溶胶的湿去除效果依次强于中雨和小雨；三种降雨类型对大尺度气溶胶均具有很好的湿去除效果，对于小尺度气溶胶也有一定的湿去除效果，却对中等尺度气溶胶的湿去除效果不明显；雨强增加将改善气溶胶的湿去除效果。另外，也研究了不同对数正态分布的雨滴谱对气溶胶湿沉降效果的影响，结果表明雨滴几何平均尺度越小，雨滴几何标准偏差越小，越有利于小尺度和中等尺

度气溶胶的湿去除，而稍稍不利于大尺度气溶胶的湿去除。同时对 Park 等[15]发展的描述封闭空间中气溶胶干沉降的矩方法和 Jung 等[6]发展的描述气溶胶湿沉降的矩方法进行了评论，认为其只适合于特定工况的计算，而随机算法理论上可以用于描述任何实际工况。

但是，应该清醒认识到，虽然颗粒群平衡模拟的随机算法可以作为大气物理学中气溶胶动力学演变过程的数值模拟平台，但是距离精确定量描述降雨过程对气溶胶的湿沉降还有相当一段长的路程。降雨对气溶胶的湿去除是一个非常复杂的过程，这里采用的微物理模型还没有考虑气溶胶的不规则形状、雨滴和气溶胶的冷凝/蒸发或核化结晶[16]、凝并[17]等现象。另外，不同化学成分气溶胶的湿沉降过程也存在差异[18]，如吸湿性气溶胶的尺度和密度等物理属性与空气湿度、悬浮高度等有关[19]，当然，雨滴的尺度、密度和酸碱度等也与高度、空气湿度和大气化学成分等密切相关[20~22]，对这些因素的描述需要建立相应的微化学模型[21,22]。另外，我们只考虑了布朗扩散、拦截和惯性碰撞三种气溶胶湿沉降机制，实际上，静电捕集也是一种重要而复杂的湿沉降机制[23,24]。

即使如此，通过对降雨过程中气溶胶湿沉降过程的清晰认识，也可以得到一些有利于工业除尘的启示。仿照降雨对气溶胶的湿去除，可以发展有效的人工喷淋过程来对火电厂产生的大量飞灰颗粒特别是危害极大的 PM 进行清除。例如，工业上广泛应用的湿式喷淋除尘器对 $PM_{2.5}$ 的除尘效率非常低，在不增加用水量的前提下，通过设计合理的喷嘴使得水雾粒径较小和较为均匀，即使得水滴几何平均尺度和几何标准偏差减小，可以预计，在仍然保持对较大尺度粉尘的高捕集效率的同时，将提高湿式除尘器对 $PM_{2.5}$ 的除尘效率。

对湿式除尘器以及静电增强湿式除尘器(颗粒荷电的湿式除尘器、液滴荷电的湿式除尘器以及颗粒和液滴荷相反电荷的湿式除尘器)的颗粒群平衡模拟与雨滴清除气溶胶的 PBM 非常类似，我们的模拟结果表明，液滴荷电、或颗粒荷电、或液滴和颗粒同时荷上相反电荷均将非常有利于湿式除尘器对可吸入颗粒物的有效捕集，相对而言，如果液滴或颗粒同时荷上相反电荷，将最有利于细微颗粒和亚微米颗粒的清除，而液滴荷电的除尘器比颗粒荷电的除尘器对可吸入颗粒物的清除效果更好。典型的传统湿式重力喷淋除尘器对 PM 的分级除尘效率仅为 5%左右；如果液滴荷电，有望使得该除尘器对 PM 的分级除尘效率达到 70%以上；如果颗粒荷电，PM 的分级除尘效率将下降为 25%；而液滴和颗粒同时荷上相反电荷的静电增强湿式除尘器中，PM 的分级除尘效率接近 100%。我们也利用 PBM 考察了外部运行条件对液滴荷电的静电增强湿式除尘器的性能影响，发现：增大含尘气流输运速度或减小液滴喷射速度；增大液气比或液滴荷质比；减小液滴几何平均尺度和几何标准偏差(使得喷雾液滴越细和越均匀)，有利于提高该种除尘器对可吸入颗粒物的除尘效率。这些工作不在此详细展开，有兴趣的读者可以参阅文献[25]～[27]。

6.2 紧凑型混合颗粒收集器对燃煤锅炉飞灰颗粒收集过程的数值模拟

传统的静电除尘器(ESP)和布袋除尘器在燃煤电厂均得到了广泛应用,布袋除尘器对于亚微米颗粒的除尘效率还略高于静电除尘器[28~30],但是单独的静电除尘器或布袋除尘器仍然无法满足日益严格的PM排放要求。ESP中静电力与惯性力的相互竞争[31]、布袋除尘器中惯性碰撞、拦截和布朗扩散等机制的相互竞争[32,33]使得它们对于较大尺度颗粒(一般大于10μm)和较小尺度颗粒(一般小于0.01μm)具有较高的除尘效率,但是对于中间尺度颗粒(特别是0.1～1μm的细微颗粒)具有相对非常低的除尘效率。不幸的是,燃煤产生的烟尘颗粒尺度谱在0.08μm和1μm处恰好存在两个主要的峰值[34],很大数量份额的烟尘颗粒均属于普通除尘技术难以脱除的中等尺度颗粒范围。随着新的火电厂污染排放标准(如对$PM_{2.5}$的严格要求等)的颁布和实施,发展新的高效PM除尘技术已经是迫在眉睫。

诸多燃煤电厂[35]对已有静电除尘器进行改造已适合机组负荷和环境排放要求,改造成本较大,而将静电除尘器与布袋除尘器串联或并联起来有望达到更高的可吸入颗粒物脱除效果[36,37]。本节对ESP与布袋除尘器串联起来的混合(复合)除尘器[紧凑型混合颗粒收集器(COHPAC)[38~40]]进行研究。COHPAC的结构如图6.11所示。这种串联除尘器不需要对目前电厂已有的静电除尘器或布袋除尘器进行较大的改造,只需要在已有的静电除尘器之后串联一个传统布袋除尘器、或已有的布袋除尘器之前添加一个传统的静电除尘器。静电除尘器负责脱除绝大部分烟尘颗粒,ESP出口排放的烟气中烟尘颗粒尺度主要为0.1～1μm,带相同类型的电荷,这些荷电颗粒将使得布袋纤维感应荷电,面对荷电颗粒的一端将带上与颗粒所带电荷相反的电荷,荷电颗粒与感应荷电纤维在镜像力的作用下相互吸引,有利于增强布袋除尘器的除尘效率。荷电颗粒沉积在布袋纤维之后与纤维间发生电中和而导致颗粒之间的凝并现象,从而在滤袋表面形成更多空隙和更开放结构的颗粒层,导致布袋除尘器非稳态除尘过程的压降减小,表面清灰效率更高、能耗更低,过滤速度增加,此时的布袋除尘器实际上可以称为静电增强布袋除尘器。

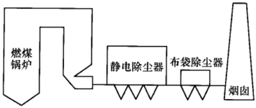


图6.11 紧凑型混合颗粒收集器(COPHAC)结构图

COHPAC 的除尘过程的数值模拟包括两部分，首先是 ESP 捕集烟尘颗粒的过程，然后是静电增强布袋除尘器对剩余的亚微米颗粒的除尘过程，下面分别对其数学模型和模拟方法进行介绍。

6.2.1　静电除尘器的数学模型和模拟方法

单区 ESP 的结构如图 6.12 所示。高压电极和接地收尘板之间产生电晕放电，高压电极附近的空气分子被电离。当烟气中的飞灰颗粒水平通过两收尘板时，颗粒与离子接触而荷电，荷电颗粒在电场力的作用下运动到收尘板而被捕集。收尘板上收集的烟尘颗粒通过机械振打(mechanical rapping)或声波激发(sonic agitation)等[41]方式而被清除。

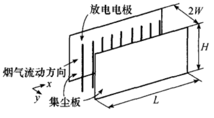


图 6.12　单区静电除尘器示意图

对除尘装置中烟尘颗粒的行为规律进行定量描述的过程，实际上就是得到颗粒群的动力学演变过程详细信息的过程，这是第 4 章所发展的颗粒群平衡模拟随机模型的应用范围，此时主要考虑颗粒群在沉积事件(即静电除尘器中的静电捕集事件)的控制下颗粒尺度分布函数的动力学演变过程，通过求解考虑颗粒沉积的颗粒群平衡方程(PBE)可以描述颗粒尺度谱的时间演变过程。此时 PBE 如下：

$$\frac{\mathrm{d}n_{\mathrm{p}}(d_{\mathrm{p}},x)}{\mathrm{d}x}=-R(d_{\mathrm{p}})n_{\mathrm{p}}(d_{\mathrm{p}},x) \tag{6.12}$$

式中：x 为沿 ESP 纵向(气流流动方向)距入口处的距离，见图 6.12；$n_{\mathrm{p}}(d_{\mathrm{p}},x)$ 为粒径为 d_{p} 的烟尘颗粒的尺度谱函数，表示距离 x、尺度为 d_{p}(m)的烟尘颗粒在单位体积内的数目浓度($\mathrm{m}^{-1}\cdot\mathrm{m}^{-3}$)；$R(d_{\mathrm{p}},x)$ 为尺度为 d_{p} 的烟尘颗粒在位置 x 处的沉积核，即烟尘颗粒被 ESP 捕集的速率(m^{-1})。

沉积核的模型与 ESP 对烟尘捕集的过程中极为复杂的两相湍流场和静电场紧密相关。目前文献中可见的各种理论模型(从分级除尘效率可以间接得到沉积核模型)[42~49]发展的沉积核模型通常均基于不同的湍流场假设，往往或者没有考虑气流场和静电场的不均匀性和脉动性；或者没有考虑颗粒场和气流场的相互影响、两相湍流场与静电场的相互作用[50~52]；或者没有考虑边界条件、不均匀温度场等的影响；或者没有考虑电极和集尘板的各种异常情况，如污染、二次扬尘、电风等[30]。为了全面准确地考虑以上因素对实际电厂 ESP 除尘性能的影响，必须发展更为复杂和精确的沉积核模型，这在当前阶段仍然是一项艰巨的研究课题。通常，人们采用修正的 Deutsch 模型来描述实际电厂 ESP 的除尘过程[28]：

$$R(d_{\mathrm{p}})=\frac{k\omega}{U_{\mathrm{av}}W} \tag{6.13}$$

式中：k 为根据现场实验结果得到的一个经验系数，对于实际电厂的静电除尘器，一般修正系数 $k=0.5$。修正的 Deutsch 模型虽然形式简单，但是通过简单的修正系数 k 往往能够较为准确的考虑湍流场和静电场的不均匀、各种异常情况等。

公式(6.13)中，U_{av} 为烟气水平输运平均速度(m/s)，$x=U_{av}t$，t 为从进入 ESP 入口开始的时间；W 为集尘板与放电电极之间的横向距离；ω 为颗粒驱进速度；D_2 为颗粒横向扩散系数，其模型如下[53,54]：

$$\begin{cases}\omega = \dfrac{qE_cC_c}{3\pi\mu d_p} \\ C_c = 1 + 2.493\dfrac{\lambda}{d_p} + 0.84\dfrac{\lambda}{d_p}\exp\left(-0.435\dfrac{d_p}{\lambda}\right)\end{cases} \tag{6.14}$$

式中：q 为颗粒荷电量；C_c 为 Cunningham 滑移修正系数；E_c 为集尘区电场强度；μ 为烟气动力黏度；λ 为烟气气体分子平均自由程。

颗粒通过两种不同的荷电机理在电晕电场中被荷电。电场荷电或碰撞荷电是离子在静电力作用下定向运动而与颗粒碰撞的结果，而扩散荷电是离子布朗随机扩散而与颗粒碰撞的结果。颗粒通过电场荷电机理所荷电量为[55]

$$\begin{cases}q_f(t) = q_\infty \dfrac{t/\tau}{1+t/\tau} \\ q_\infty = \pi\varepsilon_0 E d_p^2 \dfrac{3\varepsilon_s}{\varepsilon_s+2} \\ \tau = \dfrac{4\varepsilon_0 E}{J}\end{cases} \tag{6.15}$$

式中：q_∞ 为饱和荷电量(C)；t 为荷电时间；τ 为电场荷电时间常数；ε_0 为真空介电常数(8.85×10^{-12} F/m)；ε_s 为颗粒的电介质常数；J 为电流密度(A/m^2)。

通常认为颗粒通过电场荷电而达到饱和荷电量的时间很短，甚至可以忽略该非稳态电场荷电过程，而认为进入 ESP 的颗粒马上就通过电场荷电方式达到了饱和荷电量 q_∞。而颗粒通过扩散荷电方式的荷电量为[55]

$$\begin{cases}q_d(t) = q^* \ln\left(1+\dfrac{t}{\tau^*}\right) \\ q^* = \dfrac{2\pi\varepsilon_0 d_p k_B T}{e} \\ \tau^* = \dfrac{8\varepsilon_0 k_B T}{d_p \bar{u}_i n_i e^2}\end{cases} \tag{6.16}$$

式中：q^* 为荷电常数(C)；τ^* 为扩散荷电时间常数；e 为电子电量，$e=1.6\times10^{-19}$ C；$\bar{u}_i$ 为气体离子的平均热运动速度(m/s)；n_i 为气体离子数密度(m^{-3})。

在扩散荷电机理下，颗粒荷电量随时间按对数增长，通常认为 $t=500\tau^*$ 或

$q_{500}=6.2q^*$ 时，颗粒已经通过扩散荷电方式达到了饱和电量。

三种典型粒径的烟尘颗粒（直径分别为 0.02μm、0.2μm、2.0μm）荷电量[依据式(6.15)和式(6.16)]随时间的变化如图 6.13 所示。可知，烟尘颗粒（2.0μm）尺度越大，荷电量越多，达到饱和荷电量的时间越短；大尺度颗粒（如 2.0μm 颗粒）主要通过电场荷电方式荷电，而小尺度颗粒（如 0.02μm 颗粒）主要通过扩散荷电方式荷电，而电场荷电和扩散荷电两种机制均对中等尺度颗粒（如 0.2μm 颗粒）的荷电产生重要影响；无论哪种尺度的颗粒，达到饱和荷电量的时间均远远小于颗粒在 ESP 中的停留时间。所以，对于实际电厂 ESP 除尘过程的数值模拟，认为颗粒在较短的时间内通过电场荷电和扩散荷电方式达到了饱和荷电量，即认为颗粒荷电量 $q(t)=q_f(t)+q_d(t)=q_\infty+q_{500}$。

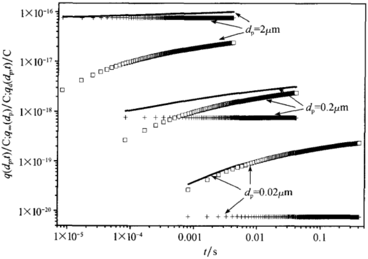


图 6.13　不同粒径烟尘颗粒荷电量

—— $q(d_p,t)$；　+ $q_\infty(d_p)$；　□ $q_d(d_p,t)$

事件驱动常体积法描述沉积过程（即间接求解 PBE）的过程如下：

(1) 计算时间步长 Δt。首先计算所有颗粒在计算区域内发生沉积事件的速率，即

$$V_s P_{depo}=V_s\int_{d_p}R(d_p)n_p(d_p)\mathrm{d}d_p=\sum_{i=1}^{N_f}R_i \tag{6.17}$$

式中：V_s 为计算区域体积；P_{depo} 为单位体积、单位时间内发生沉积事件的总概率；N_f 为虚拟颗粒总数目；R_i 为虚拟颗粒 i 的沉积核。

2 次沉积事件之间的时间间隔如下计算：

$$\Delta t=\frac{1}{V_s P_{depo}}$$

(2) 通过满足均匀分布的随机数 $r(0\leqslant r\leqslant 1)$ 来选择发生沉积事件的主颗粒。如果

$$\sum_{m=1}^{i-1} R_m \Delta t < r \leqslant \sum_{m=1}^{i} R_m \Delta t \tag{6.18}$$

则认为虚拟颗粒 i 被 ESP 所捕集。

(3) 处理沉积事件的后果。如果虚拟颗粒 i 判定发生沉积事件，则该颗粒被抛弃而不再继续跟踪。当虚拟颗粒数目减少到初始数目的一半时，把现存的所有虚拟颗粒拷贝一份并添加到虚拟颗粒数列中，同时把新的虚拟颗粒数列中所有虚拟颗粒的数目权值均各自减半，此时计算区域内虚拟颗粒总数目将恢复到初始值，计算区域体积也将保持不变。在下一个时间步长内，继续描述这些新虚拟颗粒的沉积过程。

EDCV 能够得到虚拟颗粒群沿 ESP 纵向距离 x 的详细信息。通过统计这些虚拟颗粒群，就可以得到烟尘颗粒群尺度谱动力学演变过程的详细信息，包括一些"宏观参数"[包括颗粒数目浓度 $N_{\mathrm{p}}(x)$、几何平均体积 $v_{\mathrm{pg}}(x)$ 和几何平均直径 $d_{\mathrm{pg}}(x)$、几何标准偏差 $\sigma_{\mathrm{pg}}(x)$、整体质量除尘效率 $\eta_{\mathrm{om}}(x)$ 和整体数目除尘效率 $\eta_{\mathrm{on}}(x)$ 等]和"微观参数"[包括分级数目除尘效率 $\eta_{\mathrm{n}}(d_{\mathrm{p}},x)$、分级质量除尘效率 $\eta_{\mathrm{m}}(d_{\mathrm{p}},x)$ 和筛下累积分布率 $Y(d_{\mathrm{p}},x)$（定义 x 处、为尺度小于 d_{p} 的所有颗粒的质量之和占所有颗粒总质量的比例）和任意 x 处颗粒尺度分布函数 $n_{\mathrm{p}}(d_{\mathrm{p}},x)$]等。在随机算法中，这些参数依据如下公式统计得到：

$$N_{\mathrm{p}}(x) = \int_{d_{\mathrm{p,min}}}^{d_{\mathrm{p,max}}} n_{\mathrm{p}}(d_{\mathrm{p}},x)\,\mathrm{d}d_{\mathrm{p}} = \sum_{i=1}^{N_{\mathrm{pf}}} w_{\mathrm{p}i} \tag{6.19}$$

$$v_{\mathrm{pg}}(x) = \exp\left(\frac{\sum_{i=1}^{N_{\mathrm{pf}}} w_{\mathrm{p}i}\ln v_{\mathrm{p}i}}{\sum_{i=1}^{N_{\mathrm{pf}}} w_{\mathrm{p}i}}\right), \quad d_{\mathrm{pg}}(x) = \left(\frac{6v_{\mathrm{pg}}(x)}{\pi}\right)^{\frac{1}{3}} \tag{6.20}$$

$$\sigma_{\mathrm{pg}}(x) = \exp\left[\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{N_{\mathrm{pf}}} w_{\mathrm{p}i}\ln^2\left(\frac{v_{\mathrm{p}i}}{v_{\mathrm{pg}}(x)}\right)}{\sum_{i=1}^{N_{\mathrm{pf}}} w_{\mathrm{p}i}}}\right] \tag{6.21}$$

$$\eta_{\mathrm{om}}(x) = 1 - \frac{\int_0^{\infty} \rho_{\mathrm{p}}\pi\frac{d_{\mathrm{p}}^3}{6} n_{\mathrm{p}}(d_{\mathrm{p}},x)\,\mathrm{d}d_{\mathrm{p}}}{\int_0^{\infty} \rho_{\mathrm{p}}\pi\frac{d_{\mathrm{p}}^3}{6} n_{\mathrm{p}}(d_{\mathrm{p}},0)\,\mathrm{d}d_{\mathrm{p}}} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{N_{\mathrm{pf}}} d_{\mathrm{p}i}^3 w_{\mathrm{p}i}}{\sum_{i=1}^{N_{\mathrm{pf}}} d_{\mathrm{p}i}^3 w_{\mathrm{p}i}(0)} \tag{6.22}$$

$$\eta_{on}(x)=1-\frac{\int_0^\infty n_p(d_p,x)\mathrm{d}d_p}{\int_0^\infty n_p(d_p,0)\mathrm{d}d_p}=1-\frac{\sum_{i=1}^{N_{pf}}w_{pi}}{\sum_{i=1}^{N_{pf}}w_{pi}(0)} \tag{6.23}$$

$$\begin{aligned}\eta_n(d_p,x)\approx\eta_m(d_p,x)&=1-\frac{\int_{d_p^-}^{d_p^+}n_p(d_p,x)\mathrm{d}d_p}{N_p(d_p,0)}\\&=1-\frac{\sum_{i=1}^{N_{pf}}w_{pi}\delta(d_{pi},d_p)}{\sum_{i=1}^{N_{pf}}w_{pi}(0)}\end{aligned} \tag{6.24}$$

$$\begin{aligned}Y(d_p,x)&=\frac{\int_{d_{p,\min}}^{d_p}\rho_p\pi\frac{d_p^3}{6}n_p(d_p,x)\mathrm{d}d_p}{\int_0^\infty\rho_p\pi\frac{d_p^3}{6}n_p(d_p,x)\mathrm{d}d_p}\\&=1-\frac{\sum_{i=1}^{N_{pf}}d_{pi}^3w_{pi}\theta(d_{pi}>d_p)}{\sum_{i=1}^{N_{pf}}d_{pi}^3w_{pi}}\end{aligned} \tag{6.25}$$

上述式中：$w_{pi}(0)$表示进口处尺度为d_{pi}的虚拟颗粒的数目权值；$\delta(d_{pi},d_p)$为 Dirac delta 函数，只有当$d_p=d_{pi}$时$\delta(d_{pi},d_p)=1$，否则$\delta(d_{pi},d_p)=0$；$\theta(X)$也为一条件选择函数：当条件 X 满足时，$\theta(X)=1$，否则$\theta(X)=0$。

6.2.2　静电增强布袋除尘器的数学模型和模拟方法

传统布袋除尘器主要在如下机理的控制下捕集烟尘颗粒：①布朗扩散；②拦截；③惯性碰撞；④重力沉积等，与液滴捕集颗粒的机理类似。小尺度颗粒在气体分子的无序撞击下偏离流体轨道而与布袋纤维发生碰撞而被捕集，大尺度颗粒由于自身惯性作用、颗粒轨道与流体轨道产生滑移、颗粒甩离流体轨道而与纤维碰撞，任何尺度的颗粒均可能因为纤维的直接拦截作用而被捕集，而过滤速度较低时大尺度颗粒由于重力作用也可能沉积在纤维上。当颗粒荷电、或布袋纤维荷电、或布袋纤维和颗粒同时荷相反电荷时，在镜像力或库仑力的作用下布袋除尘器的除尘效率将明显提高，这归结为静电吸引机理的影响。

清洁布袋除尘器运行的初始阶段、或含尘浓度较低时，布袋除尘器的除尘过程可视为稳态过程。此时布袋除尘器对尺度为 d_p 的颗粒的除尘效率为

$$\eta_c = 1 - \exp\left[-\frac{4\alpha_f \eta_s h}{\pi(1-\alpha_f)d_f}\right] \tag{6.26}$$

式中：η_s 为单纤维除尘效率；α_f 为纤维填充密度；d_f 为纤维直径；h 为布袋厚度。

考虑布朗扩散、拦截、惯性碰撞、重力沉积和静电吸引机制的单纤维除尘效率的数学模型为

$$\begin{aligned}\eta_s &= \gamma[1-(1-\eta_{diff})(1-\eta_{inte})(1-\eta_{impa})(1-\eta_{grav})(1-\eta_{elc})]\\ &\approx \gamma(\eta_{diff}+\eta_{inte}+\eta_{impa}+\eta_{grav}+\eta_{elc})\end{aligned} \tag{6.27}$$

式中：η_{diff}、η_{inte}、η_{impa}、η_{grav}和 η_{elc}分别表示布朗扩散、拦截、惯性碰撞、重力沉积和静电吸引机制独立作用时的单纤维除尘效率；γ 为黏结效率，即考虑颗粒反弹等现象对于除尘效率的影响而导致颗粒与纤维碰撞但无法被捕集的现象。它们的数学模型如下：

布朗扩散和拦截机制[56,57]：

$$\begin{cases}\eta_d = 1.6\times\left(\dfrac{1-\alpha_f}{Ku}\right)^{\frac{1}{3}} Pe^{-\frac{2}{3}} C_1 C_2\\ \eta_r = 0.6\times\dfrac{1-\alpha_f}{Ku}\left(\dfrac{I^2}{1+I}\right)\left(1+1.996\dfrac{Kn}{I}\right)\\ Ku = -0.5\ln\alpha_f - 0.75 + \alpha_f - 0.25\alpha_f^2\\ Pe = \dfrac{d_f U_g}{D_{diff}}\\ D_{diff} = \dfrac{k_B T C_c}{3\pi\mu_g d_p}\\ C_c = 1 + 2.493\dfrac{\lambda}{d_p} + 0.84\dfrac{\lambda}{d_p}\exp\left(-0.435\dfrac{d_p}{\lambda}\right)\\ C_1 = 1 + 0.388 Kn_f\left[\dfrac{(1-\alpha_f)Pe}{Ku}\right]^{\frac{1}{3}}\\ Kn_f = \dfrac{2\lambda}{d_f}\\ C_2 = \dfrac{1}{1+1.6\times\left(\dfrac{1-\alpha_f}{Ku}\right)^{\frac{1}{3}} Pe^{-\frac{2}{3}} C_1}\\ I = \dfrac{d_p}{d_f}\end{cases} \tag{6.28}$$

惯性碰撞机制[58]：

$$\begin{cases}\eta_I = \dfrac{St_K^3}{St_K^3 + 0.77 St_K^2 + 0.22}\\ St_K = \dfrac{\rho_p d_p^2 U_g C_c}{18\mu_g d_f}\end{cases} \tag{6.29}$$

重力沉积机制[59]：

$$\eta_g = \frac{d_f g}{U_g^2} St_K = \frac{\rho_p d_p^2 g C_c}{18\mu_g U_g^2} \tag{6.30}$$

静电吸引机制[60,61]：

$$\begin{cases} \eta_e = \dfrac{3\pi(1-\alpha_f)}{400\alpha_f} K_{ex} \\ K_{ex} = \dfrac{\omega_p}{U_g} \end{cases} \tag{6.31}$$

黏结效率 γ 为[62]

$$\gamma = \begin{cases} 1 & St_K < 0.01 \\ 0.00318 St_K^{-1.248} & St_K \geqslant 0.01 \end{cases} \tag{6.32}$$

布袋除尘器的除尘过程非常复杂，主要原因在于其除尘过程为非稳态过程，分级除尘效率和压降均随时间而改变。随着布袋纤维上所沉积的颗粒越来越多，沉积的粉尘颗粒也在一定程度上起到过滤器的功效，对除尘过程产生一定程度的影响。Thomas 等[32,33]发展了一种复杂模型来考虑非稳态除尘过程。对于沉积有颗粒的纤维，所形成的颗粒晶簇(dendrite)被认为是新形成的“纤维”，这些颗粒晶簇与已有的纤维一起共同作用以捕集颗粒物。该模型认为布袋除尘器的布袋是由若干层纤维排列而组成，它们针对每一个时间步长和每一层纤维计算烟尘颗粒被捕集的非稳态过程。并且该模型假设颗粒晶簇纤维和原始纤维独立地捕集烟尘颗粒，而忽略两者之间的相互作用。赵钟鸣等[60,63]发展了一种简便模型来考虑荷尘量对非稳态布袋除尘器除尘性能的影响，该模型把纤维和包裹在其中的颗粒看作一个整体(当量纤维)，此时随着除尘过程的进行，纤维层中的荷尘量不断增加，当量纤维的直径 d_f'和纤维层的当量填充密度 α_f'也逐渐增大，把 d_f'和 α_f'分别取代稳态除尘效率公式(6.26)中的 d_f 和 α_f，即得到非稳态除尘效率，非稳态除尘过程的压降模型也类似处理。本节采用赵钟鸣等[60,63]的荷尘纤维除尘效率模型。纤维当量直径 d_f'和当量填充密度 α_f' 的数学模型如下：

$$\begin{cases} \alpha_f' = K_d^2 \alpha_f \\ d_f' = K_d d_f \\ K_d = 1 + \dfrac{W_d}{\alpha_f \rho_p h} \end{cases} \tag{6.33}$$

式中：K_d 为荷尘系数；W_d 为单位面积布袋荷尘量(kg/m^2)；h 为布袋厚度。

值得注意的是，该模型认为整个纤维层中各纤维的尘粒沉积量均匀分布，而实际上有实验表明表面纤维层的沉积量较深层纤维层的沉积量更大[64]，所以该模型本身即存在一定程度的误差。

时间 t 处、单位面积布袋纤维收集的灰尘颗粒的总质量为

$$W_{\mathrm{d},t}=\sum_{i=1}^{n_c}\frac{1}{6}\pi\rho_p\eta'_{c,i,t}N_i d_{pi}^3 U_g\Delta t \qquad (\mathrm{kg/m^2}) \tag{6.34}$$

式中：n_c 为颗粒类的数目；N_i 为静电除尘器之后、布袋除尘器之前尺度为 d_{pi} 的烟尘颗粒的数目浓度($\mathrm{m^{-3}}$)；U_g 为布袋迎风面积；$\eta'_{c,i,t}$为 t 时刻、荷尘纤维对尺度为 d_{pi} 的颗粒的除尘效率：

$$\begin{cases}\eta'_{c,i,t}=1-\exp\left[-\dfrac{4\alpha'_f\eta'_{s,i,t}h}{\pi(1-\alpha'_f)d'_f}\right]\\ \eta'_{s,i,t}=\gamma'_{i,t}(\eta'_{\mathrm{diff},i,t}+\eta'_{\mathrm{inte},i,t}+\eta'_{\mathrm{impa},i,t}+\eta'_{\mathrm{grav},i,t}+\eta'_{\mathrm{elc},i,t})\end{cases} \tag{6.35}$$

式中：$\eta'_{s,i,t}$、$\eta'_{\mathrm{diff},i,t}$、$\eta'_{\mathrm{inte},i,t}$、$\eta'_{\mathrm{impa},i,t}$、$\eta'_{\mathrm{grav},i,t}$、$\eta'_{\mathrm{elc},i,t}$、$\gamma'_{i,t}$分别为 t 时刻荷尘单纤维的各种效率。把 d'_f和 α'_f分别取代公式(6.28)～(6.31)中的 d_f 和 α_f，即可得到这些效率。

另外，t 时刻、布袋除尘器的总质量除尘效率为

$$\eta'_{c,t}=\frac{\sum_{i=1}^{n_c}\frac{1}{6}\pi\rho_p\eta'_{c,i,t}N_i d_{pi}^3}{\sum_{i=1}^{n_c}\frac{1}{6}\pi\rho_p N_i d_{pi}^3} \tag{6.36}$$

布袋除尘器的压降为[32,33,65,66]

$$\Delta P=64\mu_g U_g h\frac{\alpha_f'^{3/2}(1+56\alpha_f'^3)}{d_f'^2} \tag{6.37}$$

静电增强布袋除尘器的除尘过程为非稳态。数值模拟的初始时刻，依照清洁布袋的除尘效率公式计算得到第一个时间步长之内单位面积纤维荷尘量[依据公式(6.34)]和压降[依据公式(6.37)]，并更新纤维当量直径 d'_f和当量填充密度 α'_f，在每个时间步长内，认为静电增强布袋除尘器处于稳态除尘过程；然后在第二个时间步长之内按照荷尘布袋的除尘效率公式(6.35)进行计算；依次循环前进，直到清灰或更换新的布袋。本节假设时间步长均为 1s。

6.2.3 紧凑型混合颗粒收集器除尘过程的数值模拟

本模拟计算针对一典型的 300MW 机组(华北电网 A 厂 3 号炉，锅炉额定蒸发量 1110t/h)[35]而进行，原 ESP 难以满足新排放标准的要求，该电厂曾对其进行了增容改造，改造前后静电除尘器的主要设计参数参照表 6.3。改造后的静电除尘器达到了很好的除尘效果，但是显然这种改造方案代价巨大。实际上，可以在原 ESP 之后串联一个布袋除尘器，组成静电布袋混合除尘装置，也有望以较低的投资改造成本达到烟尘排放标准。在本节中，我们考察 COPHAC 和改造后的 ESP

的除尘效果。

表 6.3 静电除尘器结构参数

参数	锅炉烟气量 /(m^3/h)	ESP 数目 /台锅炉	ESP 通流面积/m^2	电场风速 /(m/s)	电场内烟气停留时间/s	同级间距 /mm	单电场长度/m	总电场长度/m
原 ESP	1 138 345	2	192.5	1.2	9.33	400	3.75	11.25
改造 ESP	1 714 680	2	220	1.08	20.22	450	3.64	21.84
参数	极板高度 /m	收尘面积 /m^2	比收尘面积 /(s/m)	长高比	直流输出电压/kV	单台电场数	承受负压 /Pa	漏风率
原 ESP	13	10 822.5	46.88	0.865	95	3	6000	<3%
改造 ESP	14.84	23 984	100.7	1.47	95 或 80	9	5730	<2.5%

通过拟合，我们采用如下三峰对数正态分布来代表火电厂进入静电除尘器之前的烟尘尺度谱：

$$n_p(d_p) = \sum_{i=1}^{3} \frac{N_{p,i}}{\sqrt{2\pi}\ln\sigma_{pg,i}} \exp\left[-\frac{\ln^2(d_p/d_{pg,i})}{2\ln^2\sigma_{pg,i}}\right]\frac{1}{d_p} \tag{6.38}$$

式中：$N_{p,i}$、$d_{pg,i}$、$\sigma_{pg,i}$分别为烟尘在不同区间的数目浓度、几何平均尺度和几何标准偏差，具体数值如表 6.4 所示。

表 6.4 燃煤锅炉进入除尘器前的烟尘尺度谱特征参数

参数	$N_{p,1}/m^{-3}$	$d_{pg,1}/\mu m$	$\sigma_{pg,1}$	$N_{p,2}/m^{-3}$	$d_{pg,2}/\mu m$	$\sigma_{pg,2}$	$N_{p,3}/m^{-3}$	$d_{pg,3}/\mu m$	$\sigma_{pg,3}$
值	5×10^{14}	0.08	1.5	1×10^{11}	2.0	2.0	1×10^{9}	10.0	1.5

本节的数值模拟中烟尘尺度范围为 $0.08\mu m \leqslant d_p \leqslant 20\mu m$，此时颗粒初始数目浓度 $N_{p,0}$达到了 $2.50\times10^{14}\ m^{-3}$，初始几何平均尺度约为 $0.11\mu m$，初始的颗粒质量分数分布与试验值[67,68]较为接近。为了进行颗粒尺度谱的初始化和统计指定时刻的颗粒尺度谱的信息，对颗粒尺度谱按照对数分类的方法划分为 100 个区间；为了减少多分散性颗粒尺度谱的统计误差，通过调整虚拟颗粒数目权值使得每个颗粒区间内初始虚拟颗粒数目不少于 100 个。本节中初始虚拟颗粒数目 $N_{f,0}$为 27 908。

布袋除尘器之前的烟尘尺度分布、烟尘的荷电分布等均依据静电除尘器末端出口的数据。假设布袋采用高效率细微颗粒过滤纤维[high-efficiency particulate air (HEPA) filters]，参照文献[33]的实验数据，布袋纤维(型号为 D306)的厚度 $h=370\mu m\pm30\mu m$，纤维填充密度 $\alpha_f=9.4\times10^{-2}\pm8\times10^{-3}$，纤维平均等价直径 $d_f=1.3\mu m\pm0.1\mu m$，来流速度 U_g 为 0.03～0.5m/s。在本节的数值模拟中，认为布袋除尘器方面的数据如下：$h=370\mu m$，$\alpha_f=9.4\times10^{-2}$，$d_f=1.3\mu m$，$U_g=0.1$，布袋除尘器采用脉冲喷吹清灰方式。

图 6.14 为几种除尘器出口的分级除尘效率曲线。可知，改造之前的原 ESP 对于 0.1～1μm 的超细微颗粒物的分级除尘效率在 70%～80%左右，总质量除尘效率为 98.62%，总数目除尘效率仅为 84.27%，还有大量亚微米颗粒尚未被脱除，除尘器出口烟尘数目浓度和质量浓度分别为 $3.9337\times10^{13}m^{-3}$ 和 133.2895mg/m³；改造后的 ESP 对于 0.1～1μm 的烟尘颗粒能够达到 80%～95%左右的分级除尘效率，其总质量除尘效率高达 99.35%，总数目除尘效率也达到了 92.89%，从 ESP 逃逸到大气环境中的亚微米颗粒物相对来说大幅度降低，出口烟尘数目浓度和质量浓度分别为 $1.7794\times10^{13}m^{-3}$ 和 62.9152mg/m³。而对于 COPHAC，也能够达到非常好的除尘效果。在新鲜布袋除尘器除尘的初始阶段，其压降较低，约为 900Pa，此时布袋除尘器对于亚微米颗粒物具有较高的除尘效率，而随着布袋荷尘量的增加，压降和穿透率都有一定程度的降低，但是仍然对亚微米颗粒物保持很好的除尘效果。一般认为压降达到 1500Pa 时需要对布袋除尘器进行清灰，清灰之前(压降 $\Delta P=1500$Pa)和清灰之后($\Delta P=900$Pa)的 COPHAC 的除尘效果见图 6.14。混合除尘器对于 0.1～1μm 的烟尘颗粒的分级除尘效率达到了 80%～100%左右，特别的是，对于 0.1～0.3μm 的烟尘颗粒，混合除尘器的分级除尘效率要高于改造之后的 ESP，但是 0.3～1μm 颗粒分级除尘效率要稍微低于改造之后的 ESP。清灰之后的 COPHAC 总质量除尘效率和总数目除尘效率分别为 99.72%和 99.48%，布袋除尘器出口烟尘数目浓度和质量浓度分别为 $1.4974\times10^{12}m^{-3}$ 和 27.4743mg/m³。而清灰之前的混合除尘器总质量和数目除尘效率分

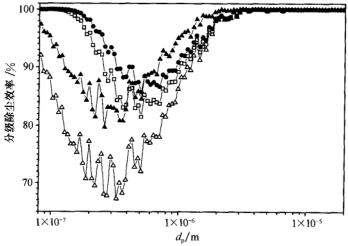
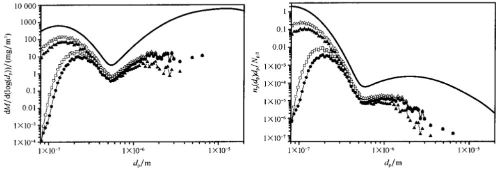


图 6.14 几种除尘器出口的分级除尘效率

—○— 原 ESP 出口； —▲— 改造 ESP 出口； —□— COHPAC 出口($\Delta P=900$Pa)；
—●— COHPAC 出口($\Delta P=1500$Pa)

别为 99.80%和 99.80%，而出口进入大气环境的烟尘数目浓度和质量浓度分别为 $7.2896\times10^{12}\,m^{-3}$ 和 42.5262mg/m³。也就是说，COPHAC 的除尘效果甚至高于改造后的 ESP。

图 6.15(a)和图 6.15(b)分别为几种除尘器的颗粒质量分数分布和颗粒尺度分布曲线。对于尺度小于 0.3μm 的亚微米颗粒，混合除尘器出口的质量分数分布曲线和颗粒尺度分布曲线均明显低于原 ESP 和改造 ESP 出口的相应曲线，这表明这些尺度的亚微米颗粒在混合除尘器中被更高效地脱除，而对于尺度大于 0.3μm 的烟尘颗粒，改造 ESP 出口的质量分数分布曲线和颗粒尺度分布曲线均明显低于混合除尘器和原 ESP 出口的相应曲线，这表明改造 ESP 对这些尺度较大的颗粒去除效果更高一些。造成这种现象的原因在于静电增强布袋除尘器对于尺度较大的颗粒存在明显的二次飞扬(即尺度较大的烟尘颗粒被没有与其接触的纤维所捕集，凝并效率较低)，布袋除尘器对于这些颗粒的除尘效率相对较低。图 6.16(a)为清灰之后单纤维除尘效率随颗粒尺度的变化的曲线，黏结效率 γ 随颗粒尺度增加而几乎呈对数衰减，这直接导致单纤维除尘效率 η_s 随颗粒尺度增加而不断降低。清灰之前单纤维除尘效率如图 6.16(b)所示，与清灰之后单纤维除尘效率基本类似，布朗扩散、拦截、惯性碰撞和重力作用等机理所控制的单纤维除尘效率并无明显变化，清灰之前静电吸引机制所控制的某尺度颗粒的单纤维除尘效率 η_{elc} 甚至要低于清灰之后对应颗粒尺度的 η_{elc}，但是清灰之前某尺度颗粒的黏结效率 γ 要明显高于清灰之后对应颗粒尺度的 γ，这直接导致清灰之后布袋纤维对于各种尺度的颗粒的除尘效率要低于清灰之前的除尘效率。但是，无论是清灰之前还是清灰之后，布袋除尘器对于尺度较大颗粒的单纤维除尘效率都非常低，这直接导致布袋除尘器对于这些颗粒较差的除尘效果。

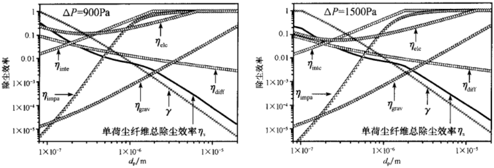


(a) 颗粒质量分数分布　　　　(b) 颗粒尺度分布

图 6.15　几种除尘器中颗粒尺度谱的演变

—除尘器进口；-△-原 ESP 出口；-▲-改造 ESP 出口；

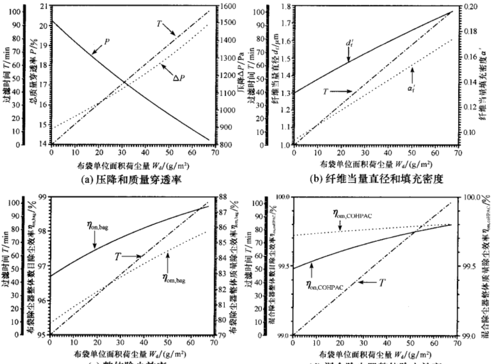
-□- COPHAC 出口(ΔP=900Pa)；-•- COPHAC 出口(ΔP=1500Pa)



(a) 清灰之后　　(b) 清灰之前

图 6.16　布袋除尘器单纤维除尘效率

以下着重考察该静电增强布袋除尘器的非稳态除尘过程。图 6.17(a)为压降 ΔP 和质量穿透率随布袋单位面积荷尘量的变化，随着布袋除尘器服务时间的延长，布袋荷尘量逐渐增加，纤维当量直径和填充密度均不断增加[见图 6.17(b)]，使得布袋除尘器的压降相应增加而穿透率相应降低。这些模拟结果与 Walsh 等[69,70]的试验结果定性吻合。单纯就布袋除尘器而言，其整体数目除尘效率和整



(a) 压降和质量穿透率　　(b) 纤维当量直径和填充密度

(c) 整体除尘效率　　(d) 混合除尘器整体除尘效率

图 6.17　布袋除尘器关键参数的非稳态演变过程

体质量除尘效率如图 6.17(c)所示，整体效率均随荷尘量增加而增加，但是整体数目除尘效率高于整体质量除尘效率，这主要是因为布袋除尘器对于数目众多的亚微米颗粒具有比质量较大的大尺度颗粒更高的分级除尘效率的缘故。而 COPHAC 的整体数目除尘效率和整体质量除尘效率如图 6.17(d)所示，两种效率均达到了 99%以上，整体质量除尘效率稍微高于整体数目除尘效率，主要原因在于静电除尘器有效脱除了质量份额很大的那些超微米颗粒的缘故。

6.2.4 小结

本节采用事件驱动常体积法求解考虑静电捕集的颗粒群平衡方程，并对静电增强布袋除尘器的非稳态除尘过程进行数值模拟，两者结合起来定量获得了烟尘颗粒尺度谱在除尘器中的演变过程，从而描述除尘器对烟尘颗粒的捕集过程，不仅能够得到颗粒总数目、几何平均尺度和几何标准偏差等宏观关键参数的演变过程，而且能够得到颗粒尺度谱、分级除尘效率等演变过程的细节信息。

一般来说，ESP 对于粒径大于 10μm 的颗粒和粒径小于 0.02μm 的颗粒均具有相当高的除尘效率。实际上，对于粒径大于 0.3μm 的颗粒，尺度越大，表面积越大，电荷越多，静电力增长速度超过自身惯性力增长速度，所以其驱进速度越大，沉积核也越大，越易被捕集；而对于粒径小于 0.3μm 的颗粒，尺度越小，表面积越小、所吸附电荷越小，但是静电力减小速度慢于惯性力减小速度，导致驱进速度和沉积核越大，越易被捕集。

针对 ESP 难以高效脱除粒径范围在 0.02～10μm 的颗粒的问题，在其后串联一个布袋除尘器构建紧凑型颗粒收集器，是对现有燃煤电厂满足可吸入颗粒物排放要求的一种可行技术方案。COPHAC 可望达到 99%以上的整体数目除尘效率和整体质量除尘效率，其中静电除尘器主要脱除大尺度烟尘颗粒和一部分亚微米烟尘颗粒，且对颗粒进行荷电，从静电除尘器逃逸出来的亚微米荷电颗粒进入布袋除尘器，借助荷电颗粒与感应荷电纤维之间的镜像力，布袋纤维在布朗扩散、拦截、惯性碰撞、静电吸引和重力沉积等除尘机理的控制下，这些质量浓度较小而数目浓度很大的亚微米颗粒被布袋除尘器所捕集。在静电除尘器之后布置的静电增强布袋除尘器由于荷尘量相对较少而具有压降低、清灰周期长和清灰效率高的特点。本节针对一典型燃煤电厂改造前的静电除尘器，讨论了对 ESP 本体进行改造和采用 COPHAC 两种技术方案，对改造前后 ESP 的除尘过程进行了颗粒群平衡模拟，并对静电增强布袋除尘器的非稳态除尘过程进行了数值模拟，数值模拟结果表明 COPHAC 能够比改造后 ESP 具有更高的 PM 除尘效率，是值得参考的一种静电除尘器或布袋除尘器改造方案。

6.3 颗粒碰撞对两相湍流流场的影响分析

气固两相流广泛存在于工程实际中，如煤粉锅炉中煤粉的输送、喷射、燃烧等。对于这些气固两相流动的数值模拟，长期以来都假定颗粒是足够稀疏的[一般判断标准是颗粒体积分数是否达到 $O(10^{-4})$]，因而可以只考虑流体对颗粒的拖曳力，而可以忽略颗粒碰撞的影响，这样处理固然简化了两相湍流模型和数值计算方法，但是实际上，在煤粉燃烧器的喷口附近，以及有壁面约束流动、特别是旋转流动的壁面附近，颗粒的体积浓度很容易超过 $O(10^{-4})$，颗粒-颗粒碰撞，以及颗粒碰撞对流体湍流的影响都很显著，颗粒之间的碰撞产生的冲量使得颗粒动量发生变化，颗粒之间的摩擦作用使得颗粒能量发生转移，颗粒相互碰撞也导致颗粒旋转速度产生或者发生改变，这将使得颗粒承受相当数量级的 Magnus 力，从而改变颗粒的运动轨迹，这些都将通过气相和固相之间的两相耦合而影响流体相湍流运动。本节通过数值模拟考察颗粒碰撞对两相流场的影响，此时的数值模拟可以归纳为考虑碰撞的多维颗粒群平衡模拟，或四向耦合两相湍流模拟。

6.3.1 模拟细节

模拟对象为工程中有广泛应用的突扩有旋气粒两相流场。突扩室的几何形状和尺寸见图 6.18。突扩室长度为 500mm，颗粒为 100μm 的玻璃微珠，材料密度为 2.5×10^3kg/m^3，质量流率为 2.72g/s。进口参数为：中心质量流率 9.9g/s，环管质量流率 38.3g/s，气体密度为 1.21kg/m^3，旋流数为 0.48，固气体积比为 2.74×10^{-5}。

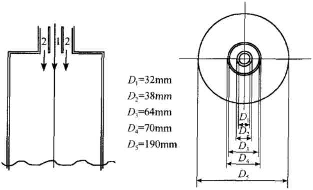


图 6.18 突扩旋流气室几何形状

1. 中心气流； 2. 环缝气流

采用第 5 章中所述的雷诺应力模型描述流体相，采用拉格朗日 Langevin 模型描述颗粒相，并考虑流体-颗粒、颗粒-颗粒之间的相互耦合。统计网格内各虚拟颗粒即

可得到颗粒平均速度、应力和两相脉动速度关联等，具体过程参照文献[71]、[72]。对于颗粒碰撞的考虑，由于所模拟工况的特殊性，所采用的方法稍微有些不同。

文献[73]提出了一个两颗粒之间发生碰撞的频率模型为

$$P_{ij}=\frac{\frac{4}{3}\pi(r_i+r_j)^3}{0.52\times\left(V-\pi r_i^2\mid\vec{v}_r\mid\Delta t-\frac{4}{3}\pi r_i^3\times\frac{1}{2}\right)} \tag{6.39}$$

式中：下标为 i 的颗粒为跟踪颗粒；下标为 j 的颗粒为控制体 C 中的某一虚拟颗粒；$|\vec{v}_r|=|\vec{v}_{pj}-\vec{v}_{pi}|$ 为两颗颗粒的相对线速度的绝对值；Δt 为时间步长；r_i 和 r_j 分别为两颗颗粒的半径；V 为控制体 C 的体积；系数 0.52 为球形颗粒紧密排列在立方体中所占体积与 V 的比例。

在 MMC 算法考虑碰撞的过程中，我们基于公式(6.39)来判断虚拟颗粒 i 是否发生碰撞和选择其碰撞伙伴，此时采用改进的 Nanbu 算法实现，可以减小搜寻伙伴颗粒的计算代价。过程如下[74]：

(1) 假设当前跟踪的虚拟颗粒 i 位于控制体 C 中，C 内虚拟颗粒总数目为 N_c，认为该虚拟颗粒 i 只可能与所在控制体 C 中的颗粒发生碰撞。对于本工况的稀疏颗粒流，只考虑中心网格 C 内虚拟颗粒的碰撞是可行的，也更为简便。

(2) 取 r 为[0,1]区间上均匀分布的随机数，根据 $\frac{j-1}{N_c-1}<r<\frac{j}{N_c-1}$，得到控制体 C 中可能与虚拟颗粒 i 发生碰撞的那一颗虚拟碰撞颗粒的序号 j（j 不同于 i），根据方程(6.39)计算碰撞概率 P_{ij}。

(3) 通过控制时间步长 Δt 使得 $P_{ij}<\frac{1}{N_c-1}(j=1,2,\cdots,N_c,j\neq i)$。如果随机数 $r<\frac{j}{N_c-1}-P_{ij}$，则认为两颗颗粒不发生碰撞。如果 $r\geqslant\frac{j}{N_c-1}-P_{ij}$，则认为颗粒之间发生碰撞，按照颗粒碰撞动力学模型计算碰撞之后颗粒的线速度，改变跟踪的第 i 颗虚拟颗粒和虚拟碰撞颗粒 k 的速度值。

6.3.2 模拟结果及分析

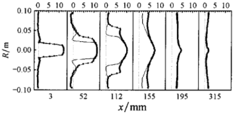
部分数值模拟结果[75]参照图 6.19。图 6.19(a)～(c)表明考虑颗粒碰撞对于颗粒相的平均速度分布会产生较为明显的影响，特别是进口区域的中心轴线附近，颗粒还没有来得及扩散到流场之中，颗粒浓度较高，颗粒之间碰撞较为频繁，所以影响要更加明显一些，如图 6.19(a)～(c)中的 $x=52$ 截面，碰撞改变了截面上速度分布的峰出现的位置；而在充分发展阶段主流部分[如图 6.19(a)～(c)中的 $x=195,315$ 截面]，则基本上没有差异，但是，应该注意到，在发展阶段的壁面附近，因为颗粒旋转产生的离心力和颗粒的扩散，颗粒往壁面运动，壁面附近颗粒浓度提

高，从而碰撞更为频繁，对颗粒相的平均速度会产生影响，如图 6.19(a)～(c)中的 $x=112$ 和 $x=155$ 截面。

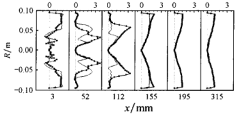
图 6.19(d)～(f)表明颗粒碰撞对于颗粒相雷诺应力有着相当明显的影响，在进口区域中心轴线附近[图 6.19(d)～(f)中 $x=52$ 截面]和在发展阶段壁面附近[图 6.19(d)中 $x=155$ 截面]尤为明显，这也主要是因为这两个区域的颗粒浓度较高、碰撞频繁。出现以上差异的原因可以解释如下：由于颗粒之间的相互碰撞使得颗粒的位置和瞬时速度发生了改变，从而使得颗粒的动能和湍动能发生了一定程度的再分配，总的趋势是使得颗粒动能和湍动能在三个坐标方向趋于各向同性(即能量高的那个坐标方向颗粒相速度和雷诺应力削弱，能量低的那个坐标方向的颗粒相速度和雷诺应力增强，总的趋势是三个坐标方向的颗粒相速度和雷诺应力数值上趋于相等)。对于本算例，首先考察颗粒平均速度的改变，数值模拟结果表明，在不考虑颗粒碰撞的情况下，在颗粒由进口区域的中心轴线附近逐渐向发展区域的壁面附近扩散的过程中，颗粒轴向和径向速度在数值上几乎均小于颗粒周向速度，当发生颗粒碰撞之后，颗粒动能发生再分配，使得颗粒动能在三个坐标方向趋于各向同性，所以表观上，在颗粒由进口区域的中心轴线附近逐渐向发展区域的壁面附近扩散的过程中，这些位置的颗粒轴向和径向速度得到相对的增强，颗粒周向速度则相对减小了。颗粒碰撞对于颗粒相平均速度影响的数量级大致保持在 10^0。再考察碰撞对颗粒相雷诺应力的改变，数值模拟结果表明，在不考虑颗粒碰撞的情况下，在进口区域中心轴线附近颗粒轴向雷诺应力要明显大于径向和周向的雷诺应力，而在发展阶段的壁面附近，颗粒轴向雷诺应力要稍微小于径向和周向的雷诺应力，所以碰撞的结果是颗粒湍动能三个坐标方向发生了迁移变化，使得这两个区域的颗粒湍动能在三个坐标方向上趋于各向同性，在表观上则是在进口区域中心轴线附近，颗粒碰撞会相对明显地削弱颗粒相轴向雷诺应力，但是却稍微增强了颗粒相径向和周向雷诺应力，在发展阶段的壁面附近，颗粒碰撞会相对明显地增强颗粒相轴向雷诺应力，却稍微削弱了颗粒相径向和周向雷诺应力。图 6.19(g)颗粒湍动能的比较结果也表明颗粒碰撞使得颗粒湍动能发生了改变，整体而言是削弱了颗粒湍动能。应该注意到，颗粒碰撞对于颗粒相雷诺应力和颗粒湍动能的影响为一个较小的数量级，大致保持在 10^{-1}。

图 6.19(h)～(j)表明考虑颗粒碰撞对于两相速度脉动关联也有着显著影响，一般来说，考虑颗粒碰撞之后使得两相脉动关联的截面分布曲线更平滑一些，没有突兀的峰出现，而且颗粒碰撞会削弱两相脉动关联。应该注意到，颗粒碰撞对于两相速度脉动关联的影响为一个较小的数量级，大致保持在 10^{-2}。以上结果与昌泽舟[76]等所得出的结论——“因为碰撞后颗粒的速度和位置的变化引起相应流体微元之间速度关联的破坏，从而造成颗粒脉动动能及颗粒-流体速度关联的降低”——基本一致。用同样的模型计算无旋工况，也得到了类似的规律。

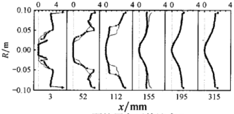
在本数值实验工况中，虽然颗粒碰撞对于气相平均速度场、气相雷诺应力有影响，但是影响很小。注意到，颗粒对气相的影响主要是通过气相雷诺应力模型中的两相相互作用项来影响气相场，但是与气相平均速度和颗粒相的数量级相比，颗粒相雷诺应力、两相速度脉动关联都要小一个甚至两个数量级，颗粒碰撞对颗粒相雷诺应力、两相速度脉动关联的影响相对而言也是一个更小的数量级，加之平均颗粒体积分数仅为 2.74×10^{-5}，所以整体而言，颗粒碰撞对于气相影响很小。图 6.19(k)～(l)分别为气相轴向平均速度场和轴向气相雷诺应力。



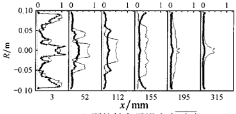
(a) 颗粒轴向平均速度$\overline{u}_p$



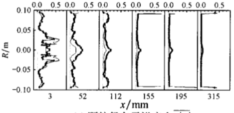
(b) 颗粒径向平均速度$\overline{v}_p$



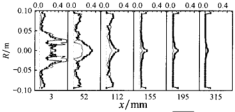
(c) 颗粒周向平均速度$\overline{w}_p$



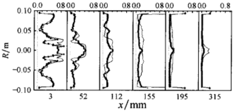
(d) 颗粒轴向雷诺应力$\overline{u_p'u_p'}$



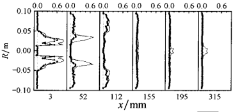
(e) 颗粒径向雷诺应力$\overline{v_p'v_p'}$



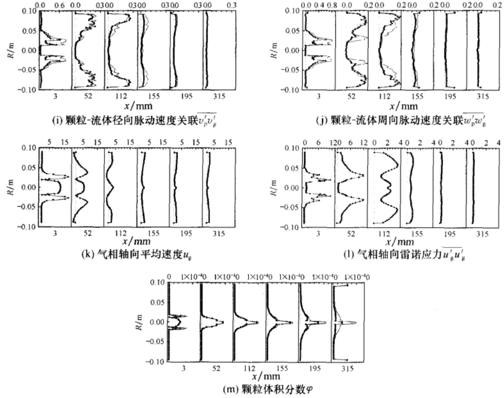
(f) 颗粒周向雷诺应力$\overline{w_p'w_p'}$



(g) 颗粒湍动能k_p



(h) 颗粒-流体轴向脉动速度关联$\overline{u_p'u_g'}$



(i) 颗粒-流体径向脉动速度关联$\overline{v_p'v_g'}$　(j) 颗粒-流体周向脉动速度关联$\overline{w_p'w_g'}$

(k) 气相轴向平均速度u_g　(l) 气相轴向雷诺应力$\overline{u_g'u_g'}$

(m) 颗粒体积分数φ

图 6.19　考虑碰撞和不考虑碰撞时两相湍流场的比较

— 不考虑碰撞；　-•- 考虑碰撞

颗粒体积分数是描述颗粒场的最为重要的几个参数之一，图 6.19(m)为颗粒体积分数的数值模拟结果，可见，尽管计算工况的平均颗粒体积分数为 2.74×10^{-5}，但是在进口区域中心轴线附近和充分发展阶段壁面附近，颗粒体积分数接近或者超过了 $O(10^{-4})$，在这些区域颗粒碰撞频繁，从而使得颗粒速度场、颗粒雷诺应力、两相速度脉动关联等发生了较为明显的改变。模拟结果同时表明，颗粒碰撞使得颗粒浓度较高的区域颗粒体积分数减小，这主要是因为颗粒碰撞改变了颗粒的位置和速度，使得颗粒相对而言不易聚团在中心区域而较易扩散到整个流场中。

6.3.3　小结

颗粒动力学演变过程与两相湍流场之间存在强烈的相互耦合关系，可以利用我们发展的数值计算平台(多维多重 Monte Carlo 算法)详细考察实际工况中颗粒动力学演变过程与两相湍流场之间的这种非线性关系，以指导工程设计和运行优化。

本节采用发展的多维 MMC 算法考察了气-固两相流中颗粒碰撞对于两相流场的影响，发现：①即使流场中平均颗粒体积浓度在较小的量级[$O(10^{-5})$]，如果颗粒浓度并不均匀使得某些局部颗粒浓度的量级达到 $O(10^{-4})$，那么也应当考虑颗粒碰撞；②颗粒碰撞对两相特别是颗粒的速度分布、颗粒雷诺应力、颗粒-流体脉动速度关联等都有明显影响。因为颗粒之间的相互碰撞使得颗粒的位置和瞬时速度发生了改变，使得颗粒的动能和湍动能发生了一定程度的再分配，结果颗粒速度和雷诺应力的分布趋于平滑和各向同性；同样由于碰撞后颗粒的速度和位置的变化破坏了颗粒与颗粒之间、颗粒与流体微团之间的速度关联，所以造成颗粒湍动能及颗粒-流体脉动速度关联降低。

6.4 展　望

以上给出的三个实例中，所考虑的颗粒群平衡模拟实际上只是跟踪颗粒尺度分布函数一个内部变量，即单变量颗粒群平衡模拟。在实际系统中，可能需要跟踪多个内部变量的动力学演变过程，如多个组分各自的颗粒尺度分布函数、颗粒尺度分布函数的多阶矩、颗粒表面积、颗粒不规则度等，所以另外一个重要研究方向是多变量颗粒群平衡模拟、多维多变量颗粒群平衡模拟，它们连同本书主要介绍的零维颗粒群平衡模拟、多维颗粒群平衡模拟，在众多复杂系统中有着广泛的应用前景。

6.4.1 多变量颗粒群平衡模拟

在复杂系统中，仅仅采用颗粒尺度一个内部变量难以量化颗粒“状态”，颗粒表面积、不规则度、孔隙率、组分浓度、表面活化能等颗粒群内部变量往往也随时间和空间而不断演变，这些颗粒状态参数在某些领域往往更为关注，如燃烧生成的 soot 颗粒团聚体的不规则度和表面积与其毒性、吸附性等紧密相关，喷雾造粒过程颗粒孔隙率是关键参数，涉及化学反应过程的复杂系统中多组分颗粒浓度等是必须跟踪的状态参数，所以同时描述颗粒群多个内部变量动力学演变过程是有着广泛的工程和科学背景。

零维单变量 PBE 的数值方法是多变量 PBE 数值方法的基础，然而，将单变量 PBE 的数值方法扩展到多变量 PBM，并非简单的研究任务，此时需要解决的关键问题是多维 PBE 的高维问题。多变量 PBE 方程如下：

$$\frac{\partial n(p,t)}{\partial t}=\left\{\frac{1}{2}\int_{\Omega_p}\beta(p-s,s,t)n(p-s,t)n(s,t)\mathrm{d}s-n(p,t)\int_{\Omega_p}\beta(p,s,t)n(s,t)\mathrm{d}s\right\}_{\text{凝并}}+\left\{\int_{\Omega_p}\gamma(p,s,t)b(s,t)S(s,t)n(s,t)\mathrm{d}s-S(p,t)n(p,t)\right\}_{\text{破碎}}$$

$$
-\left\{\left[\frac{\partial(I(p,t)n(p,t))}{\partial p}\right]\middle\|\left[C_{\text{sur}}D_{\text{sur}}(p-p_0,t)n(p-p_0,t)\right.\right.
$$

$$
\left.\left.-C_{\text{sur}}D_{\text{sur}}(p,t)n(p,t)\right]\right\}_{\text{冷凝/蒸发}}+\{J(p,t)\delta(p_{\text{nul}},p)\}_{\text{成核}}
$$

$$
-\{E(p,t)n(p,t)\}_{\text{沉积}}+\{R_{\text{chemical}}\}+\{R_{\text{other}}\} \tag{6.40}
$$

式中：p 为颗粒群内部变量集，如颗粒尺度 v、颗粒表面积 s、颗粒孔隙率 ε、颗粒分形维度 D_{f}、颗粒内部组分 i 的浓度 C_i 等；$\Omega_p\in \mathrm{R}^{\xi}(\xi=1,2,\cdots,\xi$ 为内部变量的个数)表示颗粒群内部变量空间域；$n(p,t)$为颗粒群内部变量 p 的分布函数，$n(p,t)$ $\mathrm{d}p$ 表示时刻 t、变量范围在 $p\sim p+\mathrm{d}p$ 内的颗粒在单位体积内的数目浓度；凝并核、破碎核、成核核、冷凝/蒸发核和沉积核等与内部变量相关。

对方程(6.41)求解的难点在于需要在高维空间 Ω_p 中进行多重积分。例如，仅考虑零维空间凝并工况时，双变量 PBE 方程如下：

$$
\frac{\partial n(x,y,t)}{\partial t}=\frac{1}{2}\int_0^x\int_0^y\beta(x-x',y-y',x',y',t)n(x-x',y-y',t)n(x',y',t)\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'
$$

$$
-n(x,y,t)\int_0^{\infty}\int_0^{\infty}\beta(x,y,x',y',t)n(x',y',t)\mathrm{d}x'\mathrm{d}y' \tag{6.41}
$$

对这种多重积分方程进行数值求解存在极大的数学困难，基于欧拉体系的确定性数值方法(矩方法、分区法等)求解多变量 PBE 的最大缺点是算法非常复杂。Diemer 和 Olson[77]扩展内插封闭矩方法以描述凝并、表面生长和破碎机理主导下两个内部变量(颗粒体积和颗粒表面积)的动力学演变过程，需要同时求解 27 个普通差分方程(ODE)；McGraw 等[78]则发展了双变量矩积分方法，需要同时求解 36 个 ODE；而采用分区法[79]求解双变量 PBE 时，甚至需要求解多达 561 个 ODE，即使简化之后的双变量分区法，ODE 方程数仍然高达 66 个[80]。另外，Fox 等[81]发展了多变量直接矩积分方法，Mantzaris 等则发表了一系列文章阐述有限差分法[82]、有限元法[83]、谱方法[84]在多变量 PBM 中的应用，Qamar 和 Warnecke[85]扩展传统的有限体积法来求解双组分凝并方程，也有研究者将双变量 PBE 转换为几个单变量 PBE，然后采用传统的数值方法(如有限差分法[86]和分区法[87])联立求解等。这些确定性数值方法大都针对双变量 PBM 问题，如需要扩展以考虑两个以上内部变量的动力学演变过程，则需要重新推导普通差分方程组和相关系数；这些方法大都仅仅考虑特定工况中的某两个内部变量在某些制定动力学事件主导下的演变过程，通用性和扩展性较差，也难以考虑空间非均匀系统；另外，矩方法、分区法等本身的固有缺陷同样带入到多变量颗粒群平衡模拟过程中来，极大地限制了其应用范围。

MC 方法一个重要的特色是其能够以一种简单而直接扩展的方式来处理高维问题(包括多维空间系统和多变量系统)，这极大地增强了其应用范围。相比较于那些描述多变量 PBM 的确定性方法，描述多变量 PBM 的 MC 方法在算法和编程

上极为简单，因为其能够得到动力学演变过程中颗粒内部结构的细节信息，可方便处理多维、多变量（多组分）、多分散性（宽筛分）颗粒群。Rosner 等利用常数目法模拟了连续区[88]和自由分子区[89]颗粒布朗凝并和结构重建或球化过程，同时跟踪两个内部变量（颗粒体积和颗粒表面积）的动力学演变过程；Kostoglou 等[90,91]也利用常数目法同时跟踪颗粒尺度和分形维度；Matsoukas 等[92]利用常数目法考察了双组分溶剂的凝并混合过程，Laurenzi 等[93]则引入"凝并概率密度函数"和"凝并表"等概念而发展了一套新的事件驱动 MC 模拟多组分颗粒凝并过程，计算代价和内存需求有望较大幅度降低；Meimaroglou 等[94]利用时间驱动 MC 求解同时发生的颗粒凝并和生长时的双变量 PBE；Efendiev 等[95,96]则利用一种复合型 MC（阶梯式常体积法和常体积法的组合）来考虑不混融的双组分（SiO_2/Fe_2O_3）气溶胶凝并和相分离等过程，实际上是将双变量 PBE 分解成两个单变量 PBE 再采用不同的 MC 联立求解等。这些研究表明，相对于矩方法和分区法等高复杂度的确定性方法，MC 方法特别适合描述多变量 PBM，其计算代价仅仅随内部变量的数目线性增长，且几乎不需要付出更多的模型和编程努力。

6.4.2　多维多变量颗粒群平衡模拟

总体来看，零维单变量 PBM 是颗粒群平衡模拟的第一阶段，至今已有近 100 年的历史，而多维 PBM 和多变量 PBM 是第二阶段，这是目前的研究热点，而能够同时描述多个颗粒群内部变量的分布函数在三维空间域和时间域内的动力学演变过程的多维多变量 PBM 是最终的研究目标。直到最近几年，才有极少数几篇文献报道了这方面的研究成果。多维多变量 PBE 更为复杂，如下所示：

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial n(\boldsymbol{x},p,t)}{\partial t}+\boldsymbol{u}_{\mathrm{c}}(t)\frac{\partial n(\boldsymbol{x},p,t)}{\partial \boldsymbol{x}}\\
=&\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}}\left(D\frac{\partial n(\boldsymbol{x},p,t)}{\partial \boldsymbol{x}}\right)+\frac{\partial(\boldsymbol{u}_{\mathrm{d}}(\boldsymbol{x},p,t)-\boldsymbol{u}_{\mathrm{c}}(\boldsymbol{x},t)-\boldsymbol{a})n(\boldsymbol{x},p,t)}{\partial \boldsymbol{x}}\\
&+\left\{\frac{1}{2}\int_{\Omega_p}\beta(\boldsymbol{x},p-s,s,t)n(\boldsymbol{x},p-s,t)n(\boldsymbol{x},s,t)\mathrm{d}s\right.\\
&\left.-n(\boldsymbol{x},p,t)\int_{\Omega_p}\beta(\boldsymbol{x},p,s,t)n(\boldsymbol{x},s,t)\mathrm{d}s\right\}_{\text{凝并}}\\
&+\left\{\int_{\Omega_p}\gamma(\boldsymbol{x},p,s,t)b(\boldsymbol{x},s,t)S(\boldsymbol{x},s,t)n(\boldsymbol{x},s,t)\mathrm{d}s-S(\boldsymbol{x},p,t)n(\boldsymbol{x},p,t)\right\}_{\text{破碎}}\\
&-\left\{\left[\frac{\partial(I(\boldsymbol{x},p,t)n(\boldsymbol{x},p,t))}{\partial p}\right]\middle\|\left[C_{\mathrm{sur}}D_{\mathrm{sur}}(\boldsymbol{x},p-p_0,t)n(\boldsymbol{x},p-p_0,t)\right.\right.\\
&\left.\left.-C_{\mathrm{sur}}D_{\mathrm{sur}}(\boldsymbol{x},p,t)n(\boldsymbol{x},p,t)\right]\right\}_{\text{冷凝/蒸发}}+\{J(\boldsymbol{x},p,t)\delta(p_{\mathrm{nul}},p)\}_{\text{成核}}\\
&-\{E(\boldsymbol{x},p,t)n(\boldsymbol{x},p,t)\}_{\text{沉积}}+\{R_{\mathrm{chemical}}\}+\{R_{\mathrm{other}}\}
\end{aligned}
\tag{6.42}
$$

式中：$n(\boldsymbol{x},p,t)$为颗粒群内部变量 p 的分布函数，$n(\boldsymbol{x},p,t)\mathrm{d}p$ 表示时刻 t、空间位置 $\boldsymbol{x}$ 处、变量范围在 $p\sim p+\mathrm{d}p$ 内的颗粒在单位体积内的数目浓度；凝并核、破碎核、成核核、冷凝/蒸发核和沉积核等不仅相关于时间和空间，而且还相关于内部变量本身。

直接积分矩方法具有求解多维多变量 PBE 的能力，但是目前的算法尚不完善[97]，只能针对双变量和某些特殊的动力学事件，Wang 和 Fox[98]把直接积分矩方法与 CFD、微混合模型和概率密度函数方法耦合起来描述化学反应沉淀法制备纳米颗粒；Dorao 和 Jakobsen[99]则最近提出了一种所谓的"最小二乘谱方法"描述空间维度、多个内部变量维度和时间维度上的颗粒群平衡方程，尚未实现与多相湍流模型的耦合。与多维多变量 PBE 的数值方法和模型方面研究工作的滞后相对比，众多知名学者[100~102]在不同科学和工程领域颗粒群平衡模拟的展望中指出，诸多复杂系统的控制、优化、机理分析、系统参数辨识、设计等艰巨的任务，可以最终归结为多维多变量颗粒群平衡模拟（能够描述相互依赖的颗粒群时间、空间和内部状态参数的动力学演变过程）中来。

6.4.3 颗粒群平衡模拟的应用领域

只要是涉及离散系统动力学演变过程的领域，都有可能采用颗粒群平衡模拟来进行准确而快速的数值模拟。仅以煤燃烧领域为例来说明颗粒群平衡模拟的适用范围。众所周知，煤燃烧过程中飞灰颗粒的动力学演变过程异常复杂，包括煤颗粒中易挥发元素高温过程的蒸发、中低温和温度下降过程的异相冷凝、过饱和气氛下气相组分的均相成核、熔融状态和扩散过程中颗粒之间的相互碰撞、凝并或团聚、煤颗粒升温过程中和燃烧过程中的破碎、无机矿物质在锅炉水冷壁上的结渣和沉积、飞灰颗粒在烟道输运过程、除尘器中和大气环境中的沉降和脱除、衡量元素在亚微米颗粒上的富集等过程，对这些过程的数值模拟均可纳入颗粒群平衡模拟的范畴。而如果扩展到整个燃烧领域，则颗粒群平衡模拟的用武之地更多，如燃烧过程中 soot 和 PAH（多环芳烃）的生成和生长、柴油机烟羽的可吸入颗粒物、燃烧合成纳米颗粒等。当然，实际模拟过程中，颗粒群平衡方程可能只是作为总包模型的一块，需要与计算流体力学（CFD）、化学反应动力学等耦合起来。我们已经利用零维颗粒群平衡模拟定量描述了可吸入颗粒物在各种除尘器（静电除尘器[31,103,104]、湿式除尘器[26]、静电增强湿式除尘器[25,26]、静电布袋混合除尘器[27]）和自然环境中的非线性动力学演变过程，感兴趣的读者可以参阅相关文献。

参考文献

[1] Mircea M, Stefan, S. A theoretical study of the microphysical parameterization of the scavenging coefficient as a function of precipitation type and rate. Atmospheric Environment,

1998,32(17):2931—2938.

[2] Mircea M, Stefan S, Fuzzi S. Precipitation scavenging coefficient: Influence of measured aerosol and raindrop size distributions. Atmospheric Environment, 2000, 34(30): 5169—5174.

[3] 彭红,秦瑜. 降水对气溶胶粒子清除的参数化. 大气科学,1992,16(5):622—630.

[4] Chate D M, Pranesha T S. Field studies of scavenging of aerosols by rain events. Journal of Aerosol Science, 2004, 35(6): 695—706.

[5] Loosmore G A, Cederwall R T. Precipitation scavenging of atmospheric aerosols for emergency response applications: Testing an updated model with new real-time data. Atmospheric Environment, 2004, 38(7): 993—1003.

[6] Jung C H, Kim Y P, Lee K W. A moment model for simulating raindrop scavenging of aerosols. Journal of Aerosol Science, 2003, 34(9): 1217—1233.

[7] Jung C H, Kim Y P, Lee K W. Analytic solution for polydispersed aerosol dynamics by a wet removal process. Journal of Aerosol Science, 2002, 33(5): 753—767.

[8] 盛裴轩,毛节太,李建国,等. 大气物理学. 北京:北京大学出版社,2003.

[9] Seinfeld J H, Pandis S N. Atmospheric chemistry and physics. New York: Wiley, 1998.

[10] Slinn W G N. Precipitation scavenging // Raderson D, editor. Atmospheric Sciences and Power Production. Washington DC: Division of Biomedical Environmental Research, US Department of Energy, 1983.

[11] Greenfield S. Rain scavenging of radioactive particulate matter from the atmosphere. Journal of Meteorology, 1957, 14(2): 115—125.

[12] Feingold G, Levin Z. The lognormal fit to raindrop spectra from frontal convective clouds in Israel. Journal of Climate and Applied Meteorology, 1986, 25(10): 1346—1364.

[13] Friedlander S K. Smoke, dust and haze: fundamentals of aerosol behavior. New York: Wiley, 1997.

[14] Garcia Nieto P J, Arganza Garcia B, Fernandez Diaz J M, et al. Parametric study of selective removal of atmospheric aerosol by below-cloud scavenging. Atmospheric Environment, 1994, 28(14): 2335—2342.

[15] Park S H, Lee K W. Analytical solution to change in size distribution of polydisperse particles in closed chamber due to diffusion and sedimentation. Atmospheric Environment, 2002, 36(35): 5459—5467.

[16] Ackerman A S, Hobbs P V, Toon O B. A model for particle microphysics, turbulent mixing, and radiative transfer in the stratocumulus-topped marine boundary layer and comparisons with measurements. Journal of the Atmospheric Sciences, 1995, 52(8): 1204—1236.

[17] Zhang L M, Michelangeli D V, Taylor P A. Numerical studies of aerosol scavenging by low-level, warm stratiform clouds and precipitation. Atmospheric Environment, 2004, 38(28): 4653—4665.

[18] Chate D M, Kamra A K. Collection efficiencies of large water drops collecting aerosol par-

ticles of various densities. Atmospheric Environment, 1997, 31(11): 1631—1635.
[19] Chate D M, Rao P S P, Naik M S, et al. Scavenging of aerosols and their chemical species by rain. Atmospheric Environment, 2003, 37(18): 2477—2484.
[20] 徐玲,秦瑜. 云下气体清除过程参数化. 环境化学,1992,11(1):1—11.
[21] 王明康,刘小红,任传森. 积云的清除作用与其酸化的数值模拟. 大气科学,1994,18(2):224—232.
[22] 秦瑜. 华南地区春季降水对污染物的清除及其酸化的数值模拟. 环境科学学报,1992,12(1):68—77.
[23] Andronache C. Diffusion and electric charge contributions to below-cloud wet removal of atmospheric ultra-fine aerosol particles. Journal of Aerosol Science, 2004, 35(12): 1467—1482.
[24] Tinsley B A, Rohrbaugh R P, Hei M. Electroscavenging in clouds with broad droplet size distributions and weak electrification. Atmospheric Research, 2001, 59-60(1): 115—135.
[25] 赵海波,郑楚光. 静电增强湿式除尘器的优化运行分析. 动力工程,2007,27(6):954—959.
[26] 赵海波,郑楚光. 静电增强湿式除尘器捕集可吸入颗粒物的定量描述. 燃烧科学与技术,2007,13(2):109—116.
[27] 赵海波. 颗粒群平衡模拟的随机模型与燃煤可吸入颗粒物高效脱除的研究[博士学位论文]. 武汉:华中科技大学,2007.
[28] 张殿印,王纯. 除尘器手册. 北京:化学工业出版社,2005.
[29] 吴忠标. 大气污染控制工程. 北京:科学出版社,2002.
[30] 郝吉明,马广大. 大气污染控制工程(第二版). 北京:高等教育出版社,2002.
[31] 赵海波,郑楚光. 单区静电除尘器捕集烟尘过程的数值模拟. 中国电机工程学报,2007,27(2):31—35.
[32] Thomas D, Penicot P, Contal P, et al. Clogging of fibrous filters by solid aerosol particles experimental and modelling study. Chemical Engineering Science, 2001, 56(11): 3549—3561.
[33] Thomas D, Contal P, Renaudin V, et al. Modelling pressure drop in HEPA filters during dynamic filtration. Journal of Aerosol Science, 1999, 30(2): 235—246.
[34] Seames W S. An initial study of the fine fragmentation fly ash particle mode generated during pulverized coal combustion. Fuel Processing Technology, 2003, 81(2): 109—125.
[35] 原永涛,林国鑫,宣伟桥,等. 火力发电厂电除尘技术. 北京:化学工业出版社,2004.
[36] 黄斌,姚强,李水清. 静电增强脱除 $PM_{2.5}$ 研究进展. 电站系统工程,2003,19(6):44—46.
[37] 黄斌,姚强,宋蔷,等. 静电对纤维滤料过滤飞灰颗粒的影响. 中国电机工程学报,2006,26(24):106—110.
[38] Chang R. Compact hybrid particulate collector (COHPAC): US Patent, 5158580. 1992.
[39] Bustard J, Durham M, Starns T, et al. Full-scale evaluation of sorbent injection for mercury control on coal-fired power plants. Fuel Processing Technology, 2004, 85(6-7): 549—

562.

[40] Chang R. COHPAC compacts emission equipment into smaller, denser unit. Power Engineering, 1996, 100(77): 22—25.

[41] Kallio G A, Stock D E. Interaction of electrostatic and fluid dynamic fields in wire-plate electrostatic precipitators. Journal of Fluid Mechanics, 1992, 240: 133—166.

[42] Kim S H, Park H S, Lee K W. Theoretical model of electrostatic precipitator performance for collecting polydisperse particles. Journal of Electrostatics, 2001, 50(3): 177—190.

[43] Deutsch W. Bewegung und Ladung der Elektrizitatstrager im Zylinderkondensator. Annals of Physics, 1922, 68: 335—344.

[44] Cooperman G. A unified efficiency theory for electrostatic precipitators. Journal of Atmospheric Environment, 1984, 18(2): 277—285.

[45] Leonard G, Mitchner M, Self S A. Particle transport in electrostatic precipitators. Journal of Atmospheric Environment, 1980, 14(11): 1289—1299.

[46] Zhao Z, Zhang G. New model of electrostatic precipitation efficiency accounting for turbulent mixing. Journal of Aerosol Science, 1992, 23(2): 115—121.

[47] 向晓东. 几种典型除尘器收集效率的扩散模型研究. 环境科学学报, 2003, 23(5): 657—661.

[48] Zhang X R, Wang L Z, Zhu K Q. An analysis of a wire-plate electrostatic precipitator. Journal of Aerosol Science, 2002, 33(11): 1595—1600.

[49] Nóbrega S W, Falaguasta M C R, Coury J R. A Study of a wire-plate electrostatic precipitator operating in the removal of polydispersed particles. Brazilian Journal of Chemical Engineering, 2004, 21(2): 275—284.

[50] Soldati A, Andreussi P, Banerjee S. Direct simulation of turbulent particle transport in electrostatic precipitators. AIChE Journal, 1993, 39(12): 1910—1919.

[51] Choi B S, Fletcher C A J. Computation of particle transport in an electrostatic precipitator. Journal of Electrostatics, 1997, 40-41: 413—418.

[52] Gallimberti I. Recent advancements in the physical modelling of electrostatic precipitators. Journal of Electrostatics, 1998, 43(4): 219—247.

[53] Bai H, Lu C, Chang C L. A model to predict the system performance of an electrostatic precipitator for collecting polydisperse particles. Journal of the Air & Waste Management Association, 1995, 45(11): 908—916.

[54] Yoo K H, Lee J S, Oh M D. Charging and collection of submicron particles in two-stage parallel plate electrostatic precipitators. Aerosol Science and Technology, 1997, 27(3): 308—323.

[55] Mizuno A. Electrostatic precipitation. IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation, 2000, 7(5): 615—624.

[56] Lee K W, Liu B Y. Theoretical study of filtration by fibrous filters. Aerosol Science and Technology, 1982, 1(2): 147—161.

[57] Payet S, Boulaud D, Madelaine G, et al. Penetration and pressure drop of a HEPA filter during loading with submicron liquid particles. Journal of Aerosol Science, 1992, 23(7): 723—735.

[58] Landahl H D, Herrmann R G. Sampling of liquid aerosols by wires, cylinders and slides and the efficiency of impaction of the droplets. Journal of Colloid Science, 1949, 4(2): 103—136.

[59] Tardos G, Pfeffer R. Interceptional and gravitational deposition of inertialess particles on a single sphere and in a granular bed. AIChE Journal, 1980, 26(4): 698—701.

[60] Zhao Z M, Tardos G I, Pfeffer R. Separation of airborne dust in electrostatically enhanced fibrous filters. Chemical Engineering Communications, 1991, 108(1/2): 307—332.

[61] Zhao Z M, Tardos G I, Pfeffer R. Separation of aerosol in electrostatically enhanced fibrous filters// Proceedings of the Second World Congress on Particle Technology. Kyoto Japan, 1990: 12—24.

[62] Tien C. Granular Filtration of Aerosols and Hydrosols. Boston: Butterworth Publishers, 1989.

[63] 赵钟鸣. 静电增强纤维除尘数学模型与应用的研究[博士学位论文]. 东北大学, 1992.

[64] Vendel J, Mulcey P, Letourneau P. Aerosol penetration inside HEPA filtration media// The 21st DOE/NRC Nucleur Air Cleuning Conf. San Diego, 1990: 799—808.

[65] Davies C N. Air Filtration. London and New York: Academic Press, 1973.

[66] Bergman W, Taylor R D, Miller H H, et al. Enhanced filtration program at LLNL// The 15th DOE Nuclear Air Cleaning Conf. Boston, 1978: CONF-780819.

[67] Markowski G R, Ensor D S, Hooper R G. A Submicron aerosol mode in flue gas from a pulverized coal utility boiler. Environmental Science & Technology, 1980, 14(11): 1400—1402.

[68] 岳勇, 陈雷, 姚强, 等. 燃煤锅炉颗粒物粒径分布和痕量元素富集特性实验研究. 中国电机工程学报, 2005, 25(18): 74—79.

[69] Walsh D C. Recent advances in the understanding of fibrous filter behaviour under solid particle load. Filtration & Separation, 1996, 33(6): 501—506.

[70] Walsh D C, Stenhouse J I T. Clogging of an electrically active fibrous filter material: Experimental results and two-dimensional simulations. Powder Technology, 1997, 93(1): 63—75.

[71] 赵海波. 湍流两相流的速度联合 PDF 输运方程模型及其数值模拟 [硕士学位论文]. 武汉: 华中科技大学, 2002.

[72] 柳朝晖. 湍流气粒两相流的 SOM-PDF 输运方程模型和 PDPA 实验研究[博士学位论文]. 武汉: 华中科技大学, 2002.

[73] 樊建人, 姚军, 张新育, 等. 气固两相流中颗粒-颗粒随机碰撞新模型. 工程热物理学报, 2001, 22(5): 629—632.

[74] 张鑑, 由长福, 徐旭常. 循环床内气固两相流中稠密颗粒间碰撞的数值模拟. 工程热物理

学报,1998,19(2):256—260.

[75] 赵海波,柳朝晖,郑楚光,等.气固两相流中颗粒碰撞的 Monte Carlo 数值模拟.计算力学学报,2005,22(3):299—304.

[76] 昌泽舟,Berlemont A,Gouesbet G.考虑颗粒间碰撞的气固两相流拉格朗日模拟.计算力学学报,2001,18(4):388—392.

[77] Diemer R B,Olson J H. Bivariate moment methods for simultaneous coagulation, coalescence and breakup. Journal of Aerosol Science,2006,37(3):363—385.

[78] Wright D,McGraw R,Rosner D E. Bivariate extension of the quadrature method of moments for modeling simultaneous coagulation and sintering particle populations. Journal of Colloid and Interface Science,2001,236(2):242—251.

[79] Xiong Y,Pratsinis S E. Formation of agglomerate particles by coagulation and sintering. Part 1. A two-dimensional solution of the population balance equation. Journal of Aerosol Science,1993,24(3):283—300.

[80] Jeong J I,Choi M. A sectional method for the analysis of growth of polydisperse non-spherical particles undergoing coagulation and coalescence. Journal of Aerosol Science, 2001,32(5):565—582.

[81] Fox R O. Bivariate direct quadrature method of moments for coagulation and sintering of particle populations. Journal of Aerosol Science,2006,37(11):1562—1580.

[82] Mantzaris N V,Daoutidis P,Srienc F. Numerical solution of multi-variable cell population balance models. I. Finite difference methods. Computers and Chemical Engineering,2001, 25(11-12):1411—1440.

[83] Mantzaris N V,Daoutidis P,Srienc F. Numerical solution of multi-variable cell population balance models. III. Finite element methods. Computers and Chemical Engineering,2001, 25(11-12):1463—1481.

[84] Mantzaris N V,Daoutidis P,Srienc F. Numerical solution of multi-variable cell population balance models. II. Spectral methods. Computers and Chemical Engineering,2001,25(11-12):1441—1462.

[85] Qamar S,Warnecke G. Solving population balance equations for two-component aggregation by a finite volume scheme. Chemical Engineering Science,2007,62(3):679—693.

[86] Briesen H. Simulation of crystal size and shape by means of a reduced two-dimensional population balance model. Chemical Engineering Science,2006,61(1):104—112.

[87] Peglow M,Kumar J,Heinrich S,et al. A generic population balance model for simultaneous agglomeration and drying in fluidized beds. Chemical Engineering Science,2007,62 (1-2):513—532.

[88] Tandon P,Rosner D E. Monte Carlo simulation of particle aggregation and simultaneous restructuring. Journal of Colloid and Interface Science,1999,213(2):273—286.

[89] Rosner D E,Yu S. MC simulation of aerosol aggregation and simultaneous spheroidization. AIChE Journal,2001,47(3):545—561.

[90] Kostoglou M, Konstandopoulos A G. Evolution of aggregate size and fractal dimension during Brownian coagulation. Journal of Aerosol Science, 2001, 32(12): 1399—1420.

[91] Kostoglou M, Konstandopoulos A G, Friedlander S K. Bivariate population dynamics simulation of fractal aerosol aggregate coagulation and restructuring. Journal of Aerosol Science, 2006, 37(9): 1102—1115.

[92] Matsoukas T, Lee K, Kim T. Mixing of components in two-component aggregation. AIChE Journal, 2006 52, (9): 3088—3099.

[93] Laurenzi I J, Bartels J D, Diamond S L. A general algorithm for exact simulation of multicomponent aggregation processes. Journal of Computational Physics, 2002, 177(2): 418—449.

[94] Meimaroglou D, Kiparissides C. Monte Carlo simulation for the solution of the bi-variate dynamic population balance equation in batch particulate systems. Chemical Engineering Science, 2006, 62(18-20): 5295—5299.

[95] Efendiev Y, Zachariah M R. Hybrid Monte Carlo method for simulation of two-component aerosol coagulation and phase segregation. Journal of Colloid and Interface Science, 2002, 249(1): 30—43.

[96] Efendiev Y, Zachariah M R. Hierarchical hybrid Monte-Carlo method for simulation of two-component aerosol nucleation, coagulation and phase segregation. Journal of Aerosol Science, 2003, 34(2): 169—188.

[97] Marchisio D L, Fox R O. Solution of population balance equations using the direct quadrature method of moments. Journal of Aerosol Science, 2005, 36(1): 43—73.

[98] Wang L, Fox R O. Comparison of micromixing models for CFD simulation of nanoparticle formation. AIChE Journal, 2004, 50(9): 2217—2232.

[99] Dorao C A, Jakobsen H A. Time-space-property least squares spectral method for population balance problems. Chemical Engineering Science, 2007, 62(5): 1323—1333.

[100] Ramkrishna D, Mahoney A W. Population balance modeling. Promise for the future. Chemical Engineering Science, 2002, 57(4): 595—606.

[101] Gerstlauer A, Gahn C, Zhou H, et al. Application of population balances in the chemical industry—current status and future needs. Chemical Engineering Science, 2006, 61(1): 205—217.

[102] Cameron I T, Wang F Y, Immanuel C D, et al. Process systems modelling and applications in granulation: a review. Chemical Engineering Science, 2005, 60(14): 3723—3750.

[103] 赵海波，郭欣，郑楚光. 300MW燃煤锅炉静电除尘器的现场实验和数值模拟. 热能动力工程，2008，23(3)：259—264.

[104] Zhao H, Zheng C. A stochastic simulation for the collection process of fly ashes in single-stage electrostatic precipitators. Fuel, 2008, 87(10-11): 2082—2089.

附　　录

附录1　主要专业术语和英文缩写

1. 主要专业术语

中　文	对应英文	中　文	对应英文
时间驱动蒙特卡罗法	Time-driven Monte Carlo method	常数目法	Constant number method
事件驱动蒙特卡罗法	Event-driven Monte Carlo method	常体积法	Constant volume method
凝并/团聚/聚集/聚结/絮凝	Coagulation/agglomeration/aggregation/coalescence/flocculation	矩方法	Method of moments
		分区法	Sectional method
破碎/分裂	Breakage/fragmentation/break-up	离散法	Discrete method
(异相)冷凝/蒸发(表面生长(表面沉积)/消融)	(Heterogeneous)Condensation/evaporation(surface growth (surface deposition)/dissolution)	离散分区法	Discrete-sectional method
		子系统	Subsystem
		虚拟颗粒	Fictitious particle
(均相)成核	(Homogeneous)Nucleation	模拟颗粒	Simulation particle
化学反应	Chemical reaction	倒数法	Inverse method
沉积/脱除/捕集/清除/沉降	Deposition/removal/collection/scavenging/sedimentation	累积概率法	Cumulative probabilities method
		接受拒绝法	Acceptance-rejection method
碰撞	Collision	球化(烧结)	Spheroidization(sintering)
布朗扩散	Brownian diffusion	湍流扩散	Turbulent diffusion

2. 主要英文缩写

英文缩写	英文全称	对应中文
ASD	Aerosol size distribution	气溶胶尺度分布
DNS	Direct numerical simulation	直接数值模拟
DSMC	Direct simulation Monte Carlo method	直接模拟蒙特卡罗算法
EDCV	Event-driven constant volume method	事件驱动常体积法
GDE	General dynamic equation	通用动力学方程
IMMC	Improved multi-Monte Carlo	改进的多重蒙特卡罗算法
MMC	Multi-Monte Carlo	多重蒙特卡罗算法
PBE	Population balance equation	颗粒群平衡方程
PBM	Population balance modeling	颗粒群平衡模拟
PDF	Probability density function	概率密度函数
PM	Particulate matter	可吸入颗粒物
PSD	Particle size distribution	颗粒尺度分布或颗粒尺度谱
PSDF	Particle size distribution function	颗粒尺度分布函数
RSD/DSD	Raindrop(droplet) size distribution	雨滴(液滴)尺度分布
SCA	Specific collection area	比集尘面积

附录 2　主要符号表

1. 英文字母

符　号	名称/单位	符　号	名称/单位
$b(u)$	母颗粒(u)破碎产生子颗粒总数目	p	冷凝组分蒸汽压力/Pa
B_{gp}	相空间扩散系数	P	概率;颗粒对湍流作用源项;布袋穿透率/%
c	颗粒迁移速度	Pe	贝克利数
C_c	滑移修正系数	P_k	获得含有 k 个原始单体的颗粒的概率
C_i	虚拟颗粒 i 的凝并总概率/($m^{-3}\cdot s^{-1}$)	p_n	颗粒所含单体数目
C_{sur}	冷凝单体数目浓度/m^{-3}	Pr	概率
d,d_p	颗粒直径/m	q	颗粒荷电量/C
D	扩散系数/(m^2/s);雷诺应力扩散项;直径/m	Q	MC 循环次数
D_f	几何分形维数	r	颗粒半径/m;[0,1]之间满足均匀分布的随机数;无量纲事件发生速率/s^{-1}
D_{sur}	冷凝/蒸发速率常数/($m^{-3}\cdot s^{-1}$)	R	摩尔气体常数/[J/(mol·K)];沉积核/s^{-1};事件发生速率/($m^{-3}\cdot s^{-1}$)
e	电子电量/C	Re	雷诺数
E	电场强度/(kV/m);碰撞效率	R_{ij}	元素相对富集系数
G	雷诺应力产生项	S	破碎核/s^{-1}
G_{gp}	相空间漂移系数	St	Stockes 数
h	布袋厚度/m;湿式除尘器纵向距离/m	T	温度/K
n_i	获得含有 i 个原始单体的颗粒的概率;垂直于壁面单元的第 i 个分量;气体离子数密度/m^{-3}	T_{CPU}	CPU 时间/s
I	冷凝/蒸发(表面生长/消融)核/(m^3/s);	T_e	流体积分时间尺度/s
J	成核核/(m^3/s);电流密度/(A/m^2);雨强/(mm/h)	$t_{i,l}$	虚拟颗粒 i 的发生一次事件 l 的时间尺度/s
k	湍动能/(m^2/s^2);经验系数,	T_l	系统动力学演变时间长度/s
K	概率;碰撞核/(m^3/s)	Sc	Schmidt 数
K_d	布袋荷尘系数	u	颗粒体积/m^3;速度场/(m/s)
K_{nucl}	成核速率/s^{-1}	v	颗粒体积/m^3;速度/(m/s)
Kn	Knudsen(克努德森)数	V	计算区域体积/m^3;直流输出电压/V
L	ESP 长度/m	V_s	子系统体积/m^3
M	冷凝组分的摩尔质量/(kg/mol);颗粒尺度分布函数的矩;颗粒质量/kg	w	虚拟颗粒数目权值
n	颗粒尺度分布函数/($m^{-3}\cdot m^{-3}$)	W	集成板与放电电极之间的横向距离/m
N	颗粒总数目浓度/m^{-3};颗粒总数目;平均碰撞(凝并)率/(m^3/s)	w_l	降雨量/(kg/m^3)
n_g	标准化颗粒尺度分布	W_d	单位面积布袋荷尘量/(kg/m^2)
N_i	含有 i 个原始单体的颗粒总数目	x	颗粒位置向量

2. 希腊字母

符 号	名称/单位	符 号	名称/单位
α	乘积因子;体积分数或填充密度;角度	μ	动力黏度/[kg/(m·s)]
β	凝并核/(m^3/s)	ν	流体运动黏度/(m^2/s)
$\gamma(u,v),\gamma$	母颗粒(u)破碎产生子颗粒(v)的概率;剪切率/s^{-1};布袋纤维黏结效率	σ	扩散系数/(m^3/s);标准偏差;方差
ε	湍动能耗散率/(m^2/s^3);雷诺应力耗散项;电介质常数	τ	电场荷电时间常数
ε_0	真空介电常数	τ_K	Kolgomorov 时间尺度/s
δ	相对误差;Dirac delta 函数	τ_l	事件 l 的特征时间尺度/s
η_c	布袋除尘效率	τ_p	颗粒弛豫时间尺度/s
η_s	单纤维除尘效率	ω	驱进速度/(m/s);高斯白噪声
η_m	分级质量除尘效率	ρ	密度/(kg/m^3)
η_n	分级数目除尘效率	ΔP	布袋除尘器压降
η_{om}	整体质量除尘效率	Δt	时间步长/两事件之间的静止时间(等待时间)/s
η_{on}	整体数目除尘效率	Δv	颗粒尺度的变化量/m^3
κ	颗粒电介质常数	Π	雷诺应力再分配项
λ	气体分子平均自由程/m	Ω	两特征时间尺度比值
λ_i	离子平均自由程	Λ	清除系数/s^{-1}

3. 上下标

符 号	名 称	符 号	名 称
0	初始时刻值;零惯性	cond	冷凝/蒸发(表面生长/消融)事件
a	公共值;空气	d	颗粒尺度分布函数;扩散荷电;液滴(雨滴)
avg,av	平均值	depo	沉积事件
B	布朗扩散	diff	布朗扩散机制
brk	破碎事件	dns	DNS 模拟值
c	碰撞事件	elc	静电捕集机制
co	连续区	eq	稳定状态,平衡状态
coag	凝并事件	f	电场荷电;纤维;虚拟颗粒
col	碰撞事件	fm	自由分子区

续表

符　号	名称	符　号	名称
g	气体；几何平均值；重力作用	old	事件发生之前
grav	重力作用机制	p	颗粒
i,j,k,l,m,n	模拟颗粒的序号，时间步序号	pre	前驱体
impa	惯性碰撞机制	real	实际颗粒
int	拦截机制	s	子系统；模拟颗粒
m	平均值	t	湍流作用
M	颗粒质量浓度	theory	理论值
max	最大值	tran	过渡区
mc	MC 方法模拟值	w	雨滴；壁面
min	最小值	—	雷诺时间平均值
N	颗粒数目浓度	*	碰撞后相关值，荷电常数值
new	事件发生之后	∞	稳定状态；极大惯性；远离颗粒处；饱和状态
nucl	成核事件	′	脉动值，异数目权值虚拟颗粒凝并准则中相关值，漂移速度，碰撞过程新坐标系，玷污布袋的当量值